

普通高等教育“十二五”规划教材

Organic
Chemistry

有机化学

(供医学长学制本科生各专业使用)

唐玉海 主编

罗一鸣 张枫 刘芸 副主编



化学工业出版社

本书为普通高等教育“十二五”规划教材，是根据医学长学制各专业本科生的教学要求编写而成的。适合在 80 到 120 学时医学长学制本科生中选用。本书在考虑有机化学系统性的同时注重有机化学与医学的融合，具有鲜明的针对性，全书共 21 章，前 14 章系统阐述了有机化学的基础理论和方法、有机波谱学、立体化学以及与医学有密切关系的基元反应和反应机理，目的是使医学生会运用有机化学原理和方法理解医学中的化学问题，后 7 章集中讲述生物体的物质基础脂类、糖、蛋白质和核酸以及生物酶化学，章节中插有思考题，为配合双语教学，每章末有英文小结，并附有习题。

本书可作为全国高等院校医学类各专业长学制的本科生教材，也可供化学、生物类各专业本科生或者从事化学教学的老师参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

有机化学/唐玉海主编. —北京: 化学工业出版社,
2011.6

普通高等教育“十二五”规划教材
ISBN 978-7-122-10691-9

I. 有… II. 唐… III. 有机化学-高等学校-教材
IV. O62

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 035479 号

责任编辑: 宋林青 于志岩
责任校对: 宋 玮

文字编辑: 孙凤英
装帧设计: 史利平

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 刷: 北京市振南印刷有限责任公司

装 订: 三河市宇新装订厂

787mm×1092mm 1/16 印张 30½ 字数 838 千字 2011 年 7 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686)

售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 49.80 元

版权所有 违者必究

《有机化学》编委会

主 编 唐玉海

副主编 罗一鸣 张枫 刘芸

编 委 (以姓氏笔画为序)

王 英 王丽娟 王茹林 巴俊杰

龙盛京 刘 芸 李平亚 张 枫

陈 麒 罗一鸣 姜慧君 姚 丽

袁 丁 徐乃进 唐玉海 谢惠定

前 言

本书为普通高等教育“十二五”规划教材。本教材是根据教育部高等学校医药学公共基础课教学指导委员会“关于医学各专业长学制有机化学教学基本要求”编写而成的，教材内容突出基本理论、基础知识和基本技能。

有机化学课程是高等学校医学类各专业本科生必修的一门重要的自然科学类基础课，目的是为医学生后续课程的学习打好必要的有机化学基础。该课程所讲授的基本概念、基本理论和方法是医学生科学素质培养的重要组成部分，具有其他课程不能替代的重要作用，是一个合格的医学科学工作者必备的。

有机化学教材，应使学生对有机化学的基本知识、基本理论和基本方法有比较系统的认识和正确的理解，应注重学生分析问题和解决问题能力的培养，注重学生探索精神和创新意识的培养，努力实现学生知识、能力、素质三位一体的协调发展。

本书在编写时着重突出以下几点。

1. 定位明确，适合医学各专业长学制本科生。
2. 注重有机化学和医学的良好融合，体现有机-生物理念。
3. 在传承知识的同时，通过讨论和新知识的引入增强启发性和时代气息。
4. 参阅大量国内外同类教材编写经验，吸收部分近年来教学与科研成果。
5. 强化有机化学英文词汇学习，章末有英文小结，以适应后续课程双语教学的需求。
6. 编写方法上考虑学生的认知规律，各章都有内容提示、问题思考和英文小结等，有利于启发学生对问题的思考和重点内容的掌握。

本教材编写过程中注重我国目前医学长学制教育现状，具有鲜明的针对性，全书共二十一章，前十四章系统阐述了有机化学的基础理论和方法，有机波谱学、立体化学以及与医学有密切关系的基元反应和反应机理，目的是使医学生学会运用有机化学原理和方法理解医学中的化学问题，后七章集中讲述生物体的物质基础脂类、糖、蛋白质和核酸以及天然生物活性有机化合物生物体内的酶促化学反应。

本书由（排名不分先后）西安交通大学唐玉海任主编，并编写第一、二、二十一章；大连医科大学徐乃进编写第三章；中南大学罗一鸣任副主编并编写第四章；西安交通大学刘芸任副主编并编写第五、八章；首都医科大学张枫任副主编并编写第六、七章；昆明医学院谢惠定编写第九章；三峡大学袁丁编写第十章；山西医科大学王茹林编写第十一章；广西医科大学龙盛京编写第十二、十三章；三峡大学王英编写第十四章；青岛大学姚丽编写第十五章；兰州大学陈麒编写第十六章；吉林大学李平亚编写第十七章；南京医科大学姜慧君编写第十八、十九章；内蒙古医学院巴俊杰编写第二十章。

本书在编写过程中得到了西安交通大学和各参编院校的大力支持，西安交通大学理学院给予了经费支持，并得到了化学工业出版社的帮助和指导，本书在编写过程中也选用了部分国内外同类教材作者的资料，2010级硕士研究生邢丽丽、宋海林同学为本教材出版做了大量文字修改工作，在此一并致谢。

虽然编者对本书的出版做了大量的工作，但由于水平有限，书中难免有疏漏和不妥之处，望同行和广大读者不吝指正。

编 者

2011年3月于西安

目 录

第一章 绪论	1	六、Diels-Alder 反应	54
一、有机化合物和有机化学	1	七、富勒烯简介	55
二、有机化学与生命科学的密切关系	1	八、共振结构理论简介和共振式	56
三、有机物化学键的特点	2	Summary	58
四、有机化合物的分类方法	5	习题	60
五、有机化学反应	6	第四章 有机化合物结构现代分析方法	63
六、研究有机化合物的一般方法	8	一、红外光谱	64
Summary	9	(一) 基本原理	64
习题	9	(二) 基团特征振动频率	66
第二章 烷烃	11	(三) 常见化合物的特征谱带	68
一、烷烃的结构与构象异构	11	(四) 红外光谱的解析	72
二、链烃的命名	14	(五) 拉曼 (Raman) 光谱简介	73
三、烷烃的物理性质	17	二、紫外-可见光谱	74
四、烷烃的化学反应	19	(一) 基本原理	74
五、环烷烃	22	(二) 影响紫外光谱的因素	76
Summary	26	(三) 共轭体系的特征吸收光谱	78
习题	26	(四) 紫外光谱在结构分析中的应用	81
第三章 烯烃、炔烃、二烯烃	28	三、核磁共振波谱	81
一、烯烃、炔烃的结构	28	(一) ^1H NMR 基本原理	81
(一) 烯烃的结构	28	(二) 化合物中质子的核磁共振和化学位移	83
(二) 炔烃的结构	29	(三) 影响化学位移的因素	84
二、烯烃、炔烃的同分异构和命名法	30	(四) 各类 ^1H 化学位移的范围	86
(一) 烯烃、炔烃的同分异构	30	(五) 自旋-自旋偶合	87
(二) 烯烃、炔烃的命名法	32	(六) 远程偶合	89
三、烯烃、炔烃的物理性质	34	(七) 化学等价、磁等价和磁不等价	89
四、烯烃、炔烃的化学性质	35	(八) 质子数目和峰面积	90
(一) 烯烃的亲电加成反应	35	(九) 图谱的解析	90
(二) 炔烃的亲电加成反应	40	(十) ^{13}C 核磁共振及多维谱简介	91
(三) 烯烃的自由基加成反应	41	四、质谱	93
(四) 硼氢化-氧化反应	42	(一) 基本原理	94
(五) 烯烃和炔烃的氧化反应	43	(二) 质谱中离子的类型	94
(六) 烯烃的环氧化反应	44	(三) 分子离子峰和分子式的确定	96
(七) 烯烃与卡宾的加成反应	45	(四) 质谱中的裂解方式	97
(八) 烯烃、炔烃的催化加氢	46	(五) 各类化合物的质谱特征	99
(九) 烯丙型氢的卤代	47	(六) 质谱技术的新进展	100
(十) 炔氢的酸性	48	五、四谱联用综合解析简介	101
(十一) 烯烃的聚合	49	Summary	103
五、共轭二烯烃	49	习题	104
(一) 二烯烃的分类与命名法	49	第五章 芳香烃	107
(二) 共轭二烯烃的特征	50	一、苯的结构	107
(三) 共轭二烯烃的结构	51	二、芳香烃的分类和命名	108
(四) 共轭效应	52	三、苯及其同系物的物理性质	110
(五) 共轭二烯烃的亲电加成	53		

四、苯及其同系物的化学性质	111	Summary	169
(一) 苯环上的亲电取代反应及机理	111	习题	170
(二) 苯环上亲电取代反应的定位规律	114	第八章 醇、酚、醚	173
(三) 烷基苯侧链的反应	118	第一节 醇	173
五、稠环芳香烃	119	一、醇的结构、分类和命名	173
六、致癌稠环芳烃	121	二、醇的物理性质	175
七、非苯芳香烃和 Hückel 规则	123	三、醇的化学性质	176
(一) 轮烯	123	四、醇在医药上的应用	184
(二) 芳香离子	123	第二节 酚	185
Summary	124	一、酚的结构、分类和命名	185
习题	124	二、酚的物理性质	186
第六章 对映异构	127	三、酚的化学性质	187
一、物质的旋光性	127	四、维生素 E	189
(一) 平面偏振光	127	第三节 醚与环氧化合物	190
(二) 比旋光度	128	一、醚的结构、分类与命名	190
二、手性与对称性	129	二、醚的物理性质	191
(一) 手性分子	129	三、醚的化学性质	192
(二) 对称因素	130	四、环氧化合物的开环反应	193
(三) 对映异构体表达方法	131	五、环氧化合物的生物活性	195
三、含一个手性碳原子化合物的对映异构	133	六、冠醚	195
四、对映异构体构型标记法	135	七、醚在医药上的应用	196
五、含两个和两个以上手性碳原子化合物的对映异构	137	Summary	196
六、含假手性碳原子的化合物	140	习题	198
七、环状化合物的对映异构	140	第九章 醛、酮、醌	200
八、对映异构与构象	142	一、醛、酮的结构和命名法	200
九、无手性碳原子化合物的对映异构	142	(一) 醛、酮的结构	200
十、外消旋体的拆分	144	(二) 醛、酮的命名法	201
十一、对映异构与生物活性	145	二、醛、酮的物理性质	202
Summary	146	三、醛、酮的化学性质	203
习题	148	(一) 亲核加成	203
第七章 卤代烃	150	(二) 羰基亲核加成的立体化学	208
一、卤代烃的分类和命名法	150	(三) 潜手性碳原子及其不对称合成	210
(一) 卤代烃的分类	150	(四) α -氢的反应	211
(二) 卤代烃的命名	151	(五) 氧化还原反应	213
二、卤代烃的物理性质	152	(六) α, β -不饱和醛、酮的共轭加成	215
三、卤代烃的化学性质	153	四、醌	216
(一) 亲核取代反应	153	(一) 醌的结构	216
(二) 亲核取代反应机理及其立体化学	154	(二) 醌的性质	217
(三) 影响亲核取代反应的因素	159	(三) 辅酶 Q 和维生素 K	218
(四) 卤代烃消除反应及机理	162	Summary	218
(五) 卤代烃消除反应与取代反应的竞争性	164	习题	220
(六) 卤代烯烃与卤代芳烃的亲核取代反应	166	第十章 羧酸和取代羧酸	223
(七) 卤代烃与金属的反应	167	一、羧酸的结构	223
		二、羧酸与取代羧酸的分类和命名	224
		三、羧酸的物理性质	226
		四、羧酸的化学性质	227
		(一) 羧酸的酸性	227
		(二) 脱羧反应	228
		(三) 羧酸还原反应	228

(四) 羧基衍生物的生成	229	第三节 生源胺的生物合成及其意义	274
五、醇酸的化学性质	231	Summary	275
(一) 酸性	231	习题	276
(二) 醇酸的氧化反应	232	第十三章 含硫、磷、砷有机化合物	278
(三) 醇酸的脱水反应	232	第一节 有机硫化物	278
(四) 酚酸的脱羧反应	233	一、硫醇和硫醚的结构和命名法	278
(五) α -醇酸的分解反应	233	二、硫醇和硫醚的物理性质	279
六、酮酸的化学性质	234	三、硫醇和硫醚的化学性质	279
(一) 酸性	234	四、磺胺类药物的合成	282
(二) 酮酸的氨基化反应	234	第二节 含磷、砷有机化合物	284
(三) 酮酸的氧化反应	235	一、有机磷化合物的分类和命名法	284
(四) 酮酸的分解反应	235	二、含磷有机化合物的结构	286
七、醇酸和酮酸的体内化学过程	236	三、膦和胺部分性质的比较	286
八、前列腺素	238	四、膦的典型反应	287
九、酮型-烯醇型互变异构	239	五、生物体内的含磷有机化合物	288
十、重要的羧酸与取代羧酸	240	六、有毒的含磷有机化合物	289
Summary	242	(一) 有机磷杀虫剂的化学性质	290
习题	244	(二) 有机磷杀虫剂在体内的转化过程	
第十一章 羧酸衍生物	246	和致死机理	291
一、羧酸衍生物的结构和命名法	246	七、含砷有机化合物的分类与命名	292
(一) 羧酸衍生物的结构	246	八、含硫、磷、砷化学毒剂及其防护	293
(二) 羧酸衍生物的命名	247	Summary	294
二、羧酸衍生物的物理性质	248	习题	294
三、羧酸衍生物的化学性质	249	第十四章 杂环化合物	296
(一) 羧酸衍生物的亲核取代反应	249	一、杂环化合物的分类和命名	296
(二) Claisen 酯缩合反应	251	(一) 杂环化合物的分类	296
(三) 羧酸衍生物的还原反应	252	(二) 杂环化合物的命名	298
(四) 酰胺的特性	253	二、含一个杂原子的五元杂环化合物	301
四、碳酸衍生物及其特性	253	(一) 咪唑、噁吩和吡咯的结构和物理	
(一) 碳酸的酰氯	253	性质	301
(二) 碳酸的酰胺及其衍生物	254	(二) 咪唑、噁吩和吡咯的化学性质	303
Summary	256	(三) 咪唑、噁吩和吡咯的衍生物	306
习题	256	三、含一个杂原子的六元杂环化合物	307
第十二章 含氮有机化合物	259	(一) 吡啶的结构和物理性质	307
第一节 硝基化合物	259	(二) 吡啶的化学性质	308
一、硝基化合物的结构、分类与命名	259	(三) 吡啶的重要衍生物	311
二、硝基化合物的物理性质	260	(四) 维生素 PP、辅酶 NAD 和辅酶	
三、硝基化合物的化学性质	260	NADP	312
四、硝基化合物在医药中的应用	261	四、含两个杂原子的五元杂环化合物	313
第二节 胺	262	(一) 唑的结构和物理性质	313
一、分类与命名	262	(二) 唑的化学性质	313
二、胺的结构	264	(三) 维生素 B ₁ 和辅酶 TPP	316
三、胺的物理性质	264	五、含两个和三个杂原子的六元杂环化	
四、胺的化学性质	265	合物	318
五、重氮盐的反应	269	(一) 二嗪环系	318
六、重氮甲烷	271	(二) 三嗪环系	320
七、酰胺的 Hofmann 重排 (降解)		六、稠杂环	321
反应	273	(一) 苯稠杂环	321
八、季铵碱的 Hofmann 消除	273	(二) 嘌呤环系	325

(三) 喋啶环系	326	四、萜类化合物的化学性质	379
七、七元杂环化合物	327	(一) 加成反应	379
八、杂环药物	328	(二) 氧化反应	381
(一) 天然杂环药物	328	(三) 脱氢反应	381
(二) 合成杂环药物	329	(四) 分子重排反应	382
九、内源性杂环化合物的生物合成	330	五、萜类化合物的生物合成	382
(一) 嘌呤碱的生物合成	330	六、典型的萜类化合物	384
(二) 嘧啶碱的生物合成	334	(一) 单萜	384
Summary	337	(二) 倍半萜	384
习题	338	(三) 双萜	385
第十五章 油脂和磷脂	340	(四) 三萜	385
第一节 油脂	340	(五) 四萜	385
一、油脂的组成、命名和结构	340	第二节 甾族化合物	386
二、油脂的物理性质	342	一、甾族化合物的结构	387
三、油脂的化学性质	343	二、甾族化合物的分类及命名法	387
四、多不饱和脂肪酸	346	三、甾族化合物的生物合成	390
五、三酰甘油的生物合成	347	四、甾族化合物的理化性质	390
第二节 磷脂	349	五、典型的甾族化合物	391
一、甘油磷脂	349	第三节 生物碱	393
二、鞘磷脂	350	一、生物碱的基本概念	393
三、磷脂与生物膜	351	二、生物碱的基本性质	394
Summary	352	三、几种重要的生物碱	395
习题	353	第四节 黄酮和异黄酮	397
第十六章 糖类	354	一、黄酮的结构与分类	397
一、单糖	355	二、黄酮类化合物的理化性质	399
(一) 单糖的分类和命名	355	三、黄酮的功效	401
(二) 单糖的结构	355	Summary	402
(三) 单糖的物理性质	360	习题	402
(四) 单糖的化学性质	361	第十八章 氨基酸和肽	404
(五) 重要的单糖及其衍生物	366	第一节 氨基酸	404
二、寡糖	367	一、氨基酸的结构、分类和命名法	404
(一) 双糖	367	二、非编码氨基酸	408
(二) 棉子糖	369	三、氨基酸的性质	409
(三) 环糊精	370	(一) 氨基酸的酸碱性质和等电点	409
三、多糖	370	(二) 氨基酸的反应	411
(一) 淀粉	370	第二节 肽	413
(二) 糖原	371	一、肽的结构和命名法	413
(三) 纤维素	372	二、多肽的性质和序列的测定	414
四、糖缀合物	372	三、生物活性肽	416
(一) 糖脂	372	Summary	420
(二) 糖蛋白	373	习题	420
(三) 蛋白聚糖	374	第十九章 蛋白质	422
Summary	374	一、蛋白质分子的大小	422
习题	376	二、蛋白质的分类	423
第十七章 天然生物活性有机化合物	377	三、蛋白质的结构	424
第一节 萜类化合物	377	(一) 蛋白质的一级结构	424
一、萜类化合物的结构和分类	378	(二) 维持蛋白质分子构象的化学键	425
二、萜类化合物的命名法	378	(三) 二面角	426
三、萜类化合物的物理性质	378	(四) 蛋白质的二级结构	427

(五) 超二级结构	429	(五) 核酸含量的测定	450
(六) 结构域	430	五、核酸的生物学功能	450
(七) 蛋白质的三级结构	431	Summary	453
(八) 蛋白质的四级结构	432	习题	454
四、蛋白质的折叠	432	第二十一章 生物体内酶催化的化学	
(一) Anfinsen 的经典实验	433	反应	456
(二) 蛋白质的折叠与去折叠的途径	433	一、酶的化学	456
(三) 分子伴侣	434	(一) 酶是特殊的生物催化剂	456
五、蛋白质结构和功能的关系	435	(二) 酶的化学本质	457
(一) 蛋白质一级结构与生物功能的		(三) 酶的化学组成	457
关系	435	(四) 酶的分类	458
(二) 蛋白质空间结构与生物功能的		(五) 酶的命名法	458
关系	435	二、酶催化的氧化还原反应	459
(三) 蛋白质分子设计	436	(一) 脱氢酶催化的氧化还原反应	459
六、蛋白质的理化性质	436	(二) 氧化酶催化的氧化还原反应	460
(一) 蛋白质的胶体性质	436	(三) 过氧化物酶和过氧化氢酶催化	
(二) 蛋白质的两性中和等电点	437	的氧化还原反应	461
(三) 蛋白质的变性	437	(四) 氧合酶催化的氧化还原反应	462
(四) 蛋白质的沉淀	438	(五) 中间电子传递体自身的氧化还原	
(五) 蛋白质的显色反应	438	反应	462
Summary	439	三、酶催化的转移反应	462
习题	440	四、酶催化的水解反应	465
第二十章 核酸	441	五、酶催化的裂解反应	467
一、核酸的分类和化学组成	441	六、酶催化的异构化反应	468
二、核酸的一级结构	445	七、酶催化的合成反应	469
三、核酸的二级结构	446	八、酶促反应的催化机理	471
(一) DNA 的二级结构	446	(一) 酶催化的专一性机理	472
(二) RNA 的二级结构	447	(二) 酶促反应的催化机理	472
四、核酸的理化性质	448	Summary	474
(一) 核酸的一般性质	448	习题	474
(二) 核酸的水解	448	参考文献	476
(三) 核酸的酸碱性及等电点	449		
(四) 核酸的变性、复性和分子杂交	449		

第一章 绪 论

内容提示

本章重点介绍有机化学的共性知识，如有机化合物分子的共价键类型及其性质、共价键参数、键的断裂方式和反应类型、有机化合物的分类、研究有机化合物的一般步骤等。

本章是为学习有机化学奠定基础而设的，是一些共性问题，其中有些知识点在中学化学或者其他化学课程中已经涉及，在此就不从头讲起，仅作总结性介绍，特别值得一提的是有些同学认为这一部分无关紧要，忽视对本章的学习，结果造成学习环节上的缺憾；本章有部分内容只能是概念性的了解，在后续章节中将进一步深化和扩展。

在学完本章以后，你应该能够回答以下问题：

1. 什么是有机化合物？什么是有机化学？
2. 有机化合物有何特点？
3. 共价键有几种类型？各自有何特点？
4. 有机化合物有何分类？
5. 研究有机化合物的一般步骤是什么？

一、有机化合物和有机化学

人类为了生存、繁衍与发展总是要同自然界打交道，考古学证实历史长河流淌过的地方都有天然产物伴随着人类活动。尽管人类与有机物打交道的历史可追溯到远古时代，但有机物概念的形成却并不久远。

1806年瑞典化学家 J. Berzelius 定义有机化合物 (organic compound) 是“生物体中的物质”；把从矿物、空气和海洋中得到的物质定义为无机物 (inorganic compound)。1828年德国化学家 F. Wöhler 在实验室里用加热的方法无意将 NH_4OCN 转变为脲



这是一个具有划时代意义的发现，它为近代有机化合物概念的确立奠定了基础。可是按 J. Berzelius 对有机化合物的定义，尿素是不可能实验室里制备出来的，所以这个实验结果在当时并不被化学家所认同。直到 1848年 L. Gmelin 根据 F. Wöhler 的实验和越来越多的有机合成事实，确立了有机化合物的新概念，即有机化合物是含碳的化合物，有机化学是研究含碳化合物的化学。

当代对有机化学的定义是研究有机化合物的来源、制备、结构、性质、应用和功能以及有关理论与方法的科学。

二、有机化学与生命科学的密切关系

有机化学最初的意义就是生物物质的化学，即以生物体中物质为研究对象。可见“有机”二字是同生命现象紧密相连而产生的，是历史的产物。按近代有机物的概念，它的确容易引起人们的“误解”。可是近 200 年来，有机化学已发展成一门庞大的学科，它同其他科学技术一道为人类创造美好生活，把世界装点得五彩缤纷，仅 2009 年一年化学家就创造了 130 万个以上新化合物。现在，从结构复杂多样的生物大分子的合成到模拟生物过程模型的确立，标志着有机合成技术已经达到了相当高的境界。

有机化学理论上和实验上的成就，为现代生物学的诞生和发展打下了坚实的基础，是生命科学的有力支柱。生命科学也为有机化学的发展充实了丰富的内容，生命科学问题永远赋予有机化学家启示。如果我们把 Nobel 奖获得者的研究成果作为当今科学研究标志的话，从 20 世纪后半期 Nobel 奖的授予对象也反映了学科之间的交叉和融合的力量。J. Watson 和 F. Crick 的 DNA 双螺旋结构分子模型的提出是生物学发展史上划时代的发现。这一发现是基于对 DNA 分子内各种化学键的本质，特别是对氢键配对充分了解的结果。T. Cech 和 S. Altman 对核酶的发现，改变了酶就是蛋白质的传统观念。美国医学家、Nobel 奖获得者 A. Kornberg 认为：“人类的形态和行为诸多方面都是由一系列各负其责的化学反应来决定的反应过程”，“生命的许多方面都可用化学语言来表达，这是一个真正的世界语”，“把生命现象理解成化学”。实践表明，几乎所有生命科学中的问题都必将接受化学的挑战。21 世纪的化学生物学是一门用化学理论、研究方法和手段在分子水平上探索生命科学问题的学科，这是化学自觉进入生物科学领域的标志。

有机化学与生命科学广泛地相互渗透，相互融合，二者的学科界限越来越模糊，令人饶有兴趣地看到，有机化学在研究生物体本义上的回归。从这个意义上说，“有机”二字必将还其生机，“误解”必将成为历史的过去。当然医学的任务就是预防和治疗疾病，预防病症的药物绝大多数为有机化合物。另外要研究药物与受体之间的关系、需要立体化学知识，再如像疯牛病、老年痴呆症都是蛋白质构象出现问题而导致的构象病。综上所述，有机化学是医学生至关重要的一门课。

三、有机物化学键的特点

无论是对无机化合物还是有机化合物，在讨论其分子结构 (structure of molecule) 时，首先必须讨论化学键 (chemical bond)。化学键是描述组成分子的原子如何结合在一起的力量。有机化学的发展，揭示了有机化合物分子中原子键合的本质是共价键 (covalent bond)。共价键概念是由 G. N. Lewis 于 1916 年首先提出来的，第一次指出原子间共用电子满足“八隅体”（即原子外层满足 8 电子结构，氢原子外层满足 2 电子结构）即可以生成共价键。通常在两原子间连一短线代表共价键共用的一对电子。1926 年量子力学理论的出现，使共价键的本质才得以阐明。共价键的量子力学理论认为成键轨道的电子云在两核之间较密，即电子云密集在原子核间，同时受两个核吸引，其内能比分别在两个原子中单独受一个核吸引平均位能较低，故能量降低而成键。密集于两原子间的电子云的作用，可以看作是同时吸引两个核，把两个核联系在一起而成化学键。

在无机化学中我们已经知道，根据原子轨道最大重叠原理，成键时轨道之间可有两种不同的重叠方式：轨道沿着键轴方向以“头碰头”方式进行重叠形成的共价键称为 σ 键；两个互相平行的轨道以“肩并肩”方式进行重叠形成的共价键称为 π 键，表 1-1 列出 σ 键和 π 键主要的特点。

表 1-1 σ 键和 π 键主要的特点

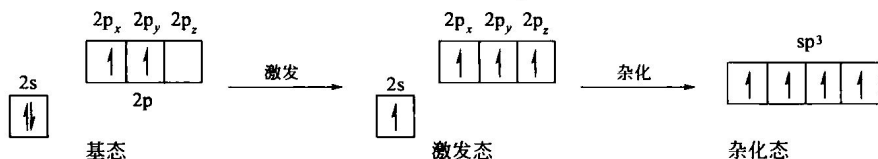
项目	σ 键	π 键
存在	可以单独存在	不能单独存在，只与 σ 键同时存在
生成	成键轨道沿键轴重叠，重叠程度大	成键 p 轨道平行重叠，重叠程度较小
性质	1. 键能较大，较稳定 2. 电子云受核约束大，不易极化 3. 成键的两个原子可沿键轴自由旋转	1. 键能小，不稳定 2. 电子云受核约束小，易被极化 3. 成键的两个原子不能沿键轴自由旋转

组成有机物分子的原子多是碳、氢、氧、氮、磷和硫及卤素的原子，它们之间的电负性相差很小，相互间结合力的本质只能是共价键。碳原子在形成共价键时，有 3 种杂化轨道

(hybrid orbital), 即 sp^3 、 sp^2 和 sp 杂化轨道。除了碳原子外, 氧原子、氮原子、磷原子和硫原子的轨道杂化也是常见的, 生命科学的发展不断证明含这些杂原子的有机物在生物学中的地位备受关注。中心原子的不同杂化状态提供了分子不同的空间形象, 这是分子所以能形成不同结构的最基本要素, 它既影响分子的局部, 也影响分子的整体。

1. sp^3 杂化轨道

碳原子在基态时的电子构型为 $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^0$, 按理只有 $2p_x$ 和 $2p_y$ 可以形成共价键, 键角 90° 。但实际在甲烷分子中, 是四个完全等同的键, 键角均为 $109^\circ 28'$ 。这是因为在成键过程中, 碳的 $2s$ 轨道有一个电子激发到 $2p_z$ 轨道, 成为 $1s^2 2s^1 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$ 。然后 3 个 p 轨道与一个 s 轨道重新组合杂化, 形成 4 个完全相同的 sp^3 杂化轨道。

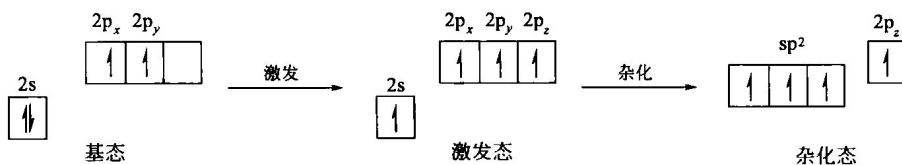


其形状一头大一头小。每个轨道是由 $s^{1/4}$ 与 $p^{3/4}$ 轨道杂化组成。这四个 sp^3 轨道的方向都指向正四面体的四个顶点, 因此 sp^3 轨道间的夹角都是 $109^\circ 28'$, 见图 1-1。

甲烷分子中碳为 sp^3 杂化, 和四个氢的 $1s$ 轨道重叠形成 CH_4 的四面体结构。

2. sp^2 杂化轨道

其碳原子在成键过程中, 首先是碳的基态 $2s$ 轨道中的一个电子激发到 $2p_z$ 空轨道, 然后碳的激发态中一个 $2s$ 轨道和两个 $2p$ 轨道重新组合杂化, 形成三个相同的 sp^2 杂化轨道, 还剩余一个 p 轨道未参与杂化。



每一个 sp^2 杂化轨道均由 $s^{1/3}$ 与 $p^{2/3}$ 轨道杂化组成, 这三个 sp^2 杂化轨道在同一平面, 夹角为 120° 。余下一个 $2p_z$ 轨道, 垂直于三个 sp^2 轨道所处的平面, 见图 1-2。

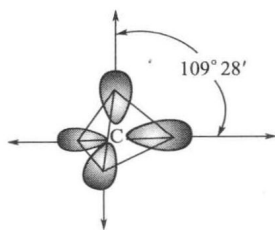


图 1-1 碳的 sp^3 杂化轨道

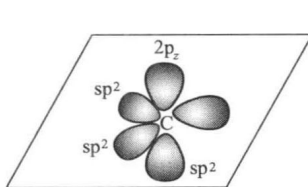


图 1-2 碳的 sp^2 杂化轨道

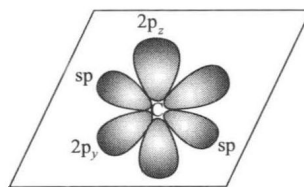
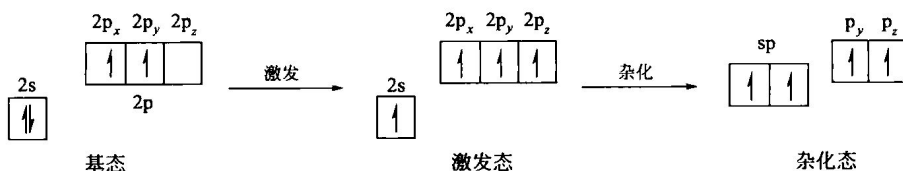


图 1-3 碳的 sp 杂化轨道

乙烯分子中的两个碳原子和其他烯烃分子中构成双键的碳原均为 sp^2 杂化。

3. sp 杂化轨道

sp 杂化轨道是碳原子在成键过程中, 碳的激发态中一个 $2s$ 轨道与一个 $2p$ 轨道重新组合杂化形成两个相同的 sp 杂化轨道, 还剩余两个 p 轨道未参与杂化。



sp 杂化轨道夹角为 180° ，呈直线形。余下两个互相垂直的 p 轨道又都与此直线垂直，见图 1-3。

乙炔分子中的碳原子和其他炔烃分子中构成碳碳叁键的碳原子均为 sp 杂化。

思考题 1-1 标出 $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{C}\equiv\text{CH}$ 分子中各碳原子的杂化状态。

表征共价键基本性质的物理量有键长、键角、键能、键的极性和极化性等。

(1) 键长 键长是指分子中两原子核心的平均距离，其单位常用 nm 或 pm 表示。

(2) 键角 键角是指分子中同一原子形成的两个化学键之间的夹角。键角所给的信息讨论有机物分子的空间构型具有十分重要的意义。如甲烷分子中的碳原子是 sp^3 杂化， $\angle\text{HCH}$ 为 $109^\circ 28'$ ，是正四面体构型；当知道甲醇的 $\angle\text{COH}$ 为 $108^\circ 9'$ 时，即可判断醇羟基的氧原子为 sp^3 杂化。

(3) 键能 键能是从共价键生成或断裂的能量因素来衡量共价键强度的物理量。在 101.3kPa 和 298.15K 下，将 1mol 理想气体分子 A—B 离解为理想状态的 A 原子和 B 原子所需的能量称为 A—B 的解离能 (dissociation energy)，用 $D(\text{A—B})$ 表示，单位为 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。请注意！决不可把键的解离能 (D) 与另一个衡量键强度的物理量键能 (E) 相混淆。只有双原子分子的 D 就是它的 E ，如 H_2 分子， $D(\text{H—H})=E(\text{H—H})=463\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。而在多原子分子中，键能是同类键解离能的平均值，如甲烷 (CH_4) 分子，若依次断裂其 4 个 C—H 键，所需键解离能是不同的，其数值分别为 $435.1\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 、 $443.5\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 、 $443.5\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 和 $338.9\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。通常说甲烷分子中 C—H 键的键能 E 为 $415.3\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ，是指键的解离能的平均值 ($435.1\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}+443.5\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}+443.5\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}+338.9\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$) / 4 = $415.3\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。在实际工作中，键的解离能更为有用。

(4) 键的极性和极化性 当两个相同原子成键时，其电子云对称地分布于两个原子中间，这种键是无极性的。如乙烷分子中 C—C 键、氢分子中 H—H 键。当两个不同原子成键时，由于两种元素的电负性不同，电子云分布不对称而靠近其中电负性较强的原子，使它带有部分负电荷，用符号 δ^- 表示，另一原子带有部分正电荷，用符号 δ^+ 表示。例如： $\overset{\delta^+}{\text{H}}-\overset{\delta^-}{\text{Br}}$ 。

① 键的极性 键的极性大小用偶极矩 (μ) 表示，它的值等于正电荷和负电荷中心的距离 d (单位为 m) 与电荷 q (单位为 C) 的乘积， $\mu=qd$ 。偶极矩 (dipole moment) 单位为 $\text{C}\cdot\text{m}$ 。偶极矩是一个向量，具有方向性，通常用 \longrightarrow 表示其方向，箭头由正电荷中心指向负电荷中心，即由 δ^+ \longrightarrow δ^- 。偶极矩值越大，键的极性也越强。有机化合物中一些常见的共价键的偶极矩在 $(1.334\sim 1.167)\times 10^{-30}\text{C}\cdot\text{m}$ 之间。对于双原子分子来说，键的偶极矩就是分子的偶极矩。但对多原子分子来说，分子的偶极矩是各键的偶极矩的向量和，也就是说多原子分子的极性不只取决于键的极性，也取决于各键在空间分布的方向，亦即取决于分子的形状。例如 CCl_4 分子中 C—Cl 键是极性键，偶极矩为 $4.868\times 10^{-30}\text{C}\cdot\text{m}$ ，但分子呈正四面体型，为对称分子，四个氯原子对称地分布于碳的周围，各键的极性相互抵消，所以 CCl_4 分子没有极性 ($\mu=0$)，而 CH_3Cl 的分子不对称，C—Cl 键的极性没有被抵消，分子的偶极矩为 $6.201\times 10^{-30}\text{C}\cdot\text{m}$ ，为极性分子。

键的极性和键的物理、化学性质密切相关，键的极性能导致分子的极性，因此对熔点、沸点和溶解度有较大影响，键的极性也能决定发生在这个键上的反应类型，甚至还能影响邻近一些键的反应活性。

② 键的极化性 共价键处于外电场中 (试剂、极性溶剂等) 时，能受外电场影响，而引起键内电子云密度的重新分布，从而改变了键的极性，这种现象称为键的极化 (polarization)。由于各种键受外电场的影响不同，而导致键的极化程度难易不同，这种键的极化难易程度称为键的极化度 (polarizability)。键的极化度主要取决于相连两原子的价电子活动

性的大小。例如 C—X 键的极化顺序是 C—I>C—Br>C—Cl>C—F。这是因为氟的原子半径小而电负性大，对价电子约束力也较大，在外电场影响下，成键电子的转移就比较小。一般来说，在同族元素（如卤素）中，原子序数愈大，在价电子层的能级就愈高，原子核对这些价电子的吸引力就愈小，它们所形成的键就容易极化。因此 C—X 键极化度按 C—F、C—Cl、C—Br、C—I 的次序递增。在碳碳共价键中， π 键比 σ 键容易极化。

键的极化是在外电场的影响下产生的，是一种暂时现象，当除去外界电场时，就恢复到原来的状态。共价键的极性和极化性是有机化合物具有各种性质的内在因素。有机化学反应的实质，就是在一定条件下，由于共价键电子云的移动而发生的原来键的断裂和新键的形成。

四、有机化合物的分类方法

迄今为止，已发现的约 2000 多万个化合物中，绝大多数是有机化合物。为有效地学习和研究它们，必须对众多的有机化合物进行科学的分类，分类方法也是基于有机物分子的结构。

目前，国内外有机化学家对有机物的分类，采用两种方法：其一是基于有机物分子结构的基本骨架特征；其二是以有机物分子结构中的官能团（functional group）或特征化学键为分类基础。

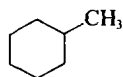
1. 按基本骨架特征分类

(1) 链状化合物 这类化合物的结构特征是碳原子与碳原子，或碳原子与其他原子均以链状相连，如正己烷 $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$ 、乙醚 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ 、尿素 H_2NCONH_2 、乙酸 CH_3COOH 等。

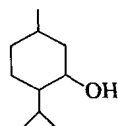
(2) 碳环化合物 这类化合物的结构特征是在分子结构中，一定有由碳原子相互连接成的环状结构部分。例如：



环戊烷



甲基环己烷



薄荷醇

从这些例子可以看出，不管分子结构中是否有其他链状结构部分，由碳原子与碳原子互相连接组成的碳环总是存在的。

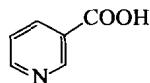
(3) 杂环化合物（heterocyclic compound）这类化合物的结构特征是在分子结构中，一定有杂环结构部分存在。所谓“杂环”即是指由碳原子和杂原子（如 N、O、S 等）所组成的环。此类化合物称为杂环化合物，例如：



呋喃



噻吩



烟酸

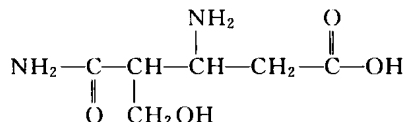
2. 按官能团不同分类

官能团（也称功能基）是指有机物分子结构中最能代表该类化合物主要性质的原子或基团，主要化学反应的发生也与它有关。如乙醇（酒精） $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ 和丙三醇（甘油） $\text{CH}_2(\text{OH})\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{OH}$ 的官能团为羟基（—OH）。羧酸类化合物的官能团是羧基（—COOH），如苯甲酸、烟酸等。一些主要的官能团如表 1-2 所示。

表 1-2 一些主要的官能团

化合物类别	官能团(或特征结构)	名称	化合物举例	化合物名称
烯烃	$\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagdown \end{array}$	碳碳双键	$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$	乙烯
炔烃	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	碳碳叁键	$\text{HC}\equiv\text{CH}$	乙炔
卤代烃	$-\text{X}(\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I})$	卤素	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$	氯乙烷
醇	$-\text{OH}$	醇羟基	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	乙醇
酚	$-\text{OH}$	酚羟基	$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$	苯酚
醚	$\begin{array}{c} \quad \\ -\text{C}-\text{O}-\text{C}- \\ \quad \end{array}$	醚基(键)	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OC}_2\text{H}_5$	乙醚
醛	$\begin{array}{c} -\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{O} \end{array}$	醛基	CH_3CHO	乙醛
酮	$\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C}=\text{O} \\ \diagdown \end{array}$	羰基	CH_3COCH_3	丙酮
羧酸	$-\text{COOH}$	羧基	CH_3COOH	乙酸
酯	$\begin{array}{c} -\text{C}-\text{O}- \\ \\ \text{O} \end{array}$	酯基(键)	$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{O}-\text{C}_2\text{H}_5 \\ \\ \text{O} \end{array}$	乙酸乙酯
酐	$\begin{array}{c} -\text{C}-\text{O}-\text{C}- \\ \quad \\ \text{O} \quad \text{O} \end{array}$	酸酐基(键)	$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{O}-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \quad \\ \text{O} \quad \text{O} \end{array}$	乙酐
酰胺	$\begin{array}{c} -\text{C}-\text{N}- \\ \quad \\ \text{O} \quad \text{H} \end{array}$	酰胺基(键)	$\text{C}_6\text{H}_5\text{NHCOCH}_3$	乙酰苯胺
酰卤	$\begin{array}{c} -\text{C}-\text{X} \\ \\ \text{O} \end{array}$	酰卤基(键)	$\begin{array}{c} \text{CH}_3-\text{C}-\text{Cl} \\ \\ \text{O} \end{array}$	乙酰氯
硝基化合物	$-\text{NO}_2$	硝基	$\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$	硝基苯
氨基化合物	$-\text{NH}_2$	氨基	$\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$	苯胺
硫醇	$-\text{SH}$	巯基	$\text{C}_2\text{H}_5\text{SH}$	乙醇硫醇
硫酚	$-\text{SH}$	巯基	$\text{C}_6\text{H}_5\text{SH}$	苯硫酚
磺酸	$-\text{SO}_3\text{H}$	磺酸基	$\text{C}_6\text{H}_5\text{SO}_3\text{H}$	苯磺酸

思考题 1-2 指出下列化合物的官能团和特征结构。

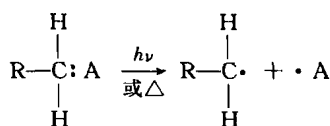


五、有机化学反应

1. 有机化学反应类型

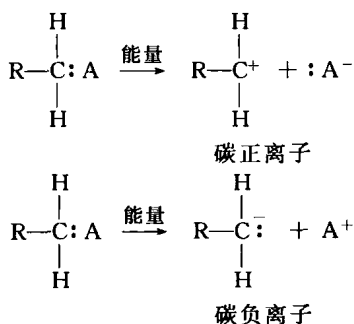
化学是一门研究物质在分子、原子层次上变化的学科。物质的化学变化就是一种原子间的重新组合和排列生成新的分子的过程。有机反应千差万别，但都需经历旧共价键的断裂和新化学键的生成。讨论有机化学反应机理 (reaction mechanism)，不外乎是看旧的共价键是怎样断裂的，新的共价键是怎样生成的。因此，共价键的断裂是研究有机化学反应最基本的知识。共价键在一定条件下，有两种断裂方式——均裂和异裂。

(1) 均裂 共价键断裂后，两个原子共用的一对电子由两个原子各保留一个，这种键的断裂方式叫做均裂 (homolysis)。均裂往往借助于较高的温度或光的照射。



由均裂产生的带有未成对电子的原子或基团称为自由基或游离基 (free radical)。有自由基参与的反应称为自由基反应。自由基反应又可分为自由基取代反应和自由基加成反应。自由基反应是高分子化学中的一个重要反应, 它也参与许多生理或病理过程。

(2) 异裂 共价键断裂后, 共用电子对只归属于原来生成共价键的两个原子中的一个, 这种键的断裂方式叫异裂 (heterolysis)。它往往被酸、碱或极性试剂所催化, 一般都在极性溶剂中进行。碳与其他原子间的 σ 键异裂时, 可得到碳正离子 (carbocation) 或碳负离子 (carbanion)。



通过共价键的异裂而进行的反应叫做离子型反应, 它有别于无机化合物瞬间完成的离子反应。它通常发生于极性分子之间, 通过共价键的异裂形成一个离子型的中间体来完成。

2. 有机化学反应中的酸碱概念

在论及化学性质时, 对有机物的酸性和碱性的认识是理解有机化学的基础。

Lewis 定义酸是能夺取一对电子以形成共价键的物质, 即酸是电子对的接受体, 常称其为 Lewis 酸; 碱是电子对的给予体, 常称其为 Lewis 碱。Lewis 酸 (如 H^+ 、 Cl^+ 、 Br^+ 、 NO_2^+ 、 BF_3 、 AlCl_3 等) 都是寻求一对电子的酸性试剂, 称其为亲电试剂 (electrophilic reagent)。由亲电试剂进攻导致的反应, 称为亲电反应 (electrophilic reaction), 根据反应事实可能是亲电取代或亲电加成。Lewis 碱 (如 H_2O 、 ROH 、 NH_3 、 RNH_2 、 OH^- 、 CN^- 等) 都是有进攻碳核倾向的、富有电子的碱性试剂, 称其为亲核试剂 (nucleophilic reagent)。由亲核试剂进攻导致的反应, 称为亲核反应 (nucleophilic reaction), 根据反应事实可能是亲核取代或亲核加成。Lewis 酸碱概念在有机化学反应中的重要性, 在今后各章的学习中将不断体现, 那时你将会更加深刻地理解它的真实意义。Lewis 酸碱电子理论所定义的酸碱物质范围相当广泛, 可用于许多有机反应。

思考题 1-3 $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ 与 Cl^+ 在一定条件下发生反应时, Cl^+ 是什么试剂?

思考题 1-4 $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{C}=\text{O} \\ | \\ \text{H} \end{array}$ 与 RO^- 在一定条件下发生反应时, RO^- 是什么试剂?

3. 有机化学反应的条件性

虽然化学热力学可以判断一个化学反应进行的方向以及进行的限度, 但是如果没有适宜的转化条件, 这些反应也是很难自发进行的。了解一个反应的条件性关系到反应过程中各步的反应速率, 反应途径的合理选择, 目标分子的快捷合成等。这些条件在实验室里主要是指浓度、温度、压力、催化剂等。催化作用是现代化学工业的核心。

生物体内的条件主要是水 (water)、细胞 (cell) 和酶 (enzyme)。生命的基本特征是新陈代谢 (metabolism)。细胞是生物体最基本的生命单位, 生物体的一切生理活动都是在细胞中进行的, 酶的催化作用是生命化学的核心。

任何一个有机化学反应都是在一定条件下进行的, 体外是这样, 体内也不例外。在本课程学习中, 有机合成内容不会涉及很多, 但是在未来的有关生命科学课程中, 会遇到大量的生物合成问题, 那时你会看到, 对生命过程深刻理解的基础是对有机化学的理解。

六、研究有机化合物的一般方法

有机化合物主要来源于两个途径: 一是从天然的动植物机体中获取; 二是化学合成。无论是从哪个途径得到的物质, 最初都是含有多种杂质的混合物。要想得到自己想要的化合物, 首先要做分离纯化工作。

(1) 分离纯化 有机化合物的分离纯化方法通常有蒸馏、重结晶和升华以及色谱法等。对于这些基本方法将在实验课中作一些基本训练。化合物经分离纯化之后, 还需检查其纯度, 通常通过测定化合物的物理常数, 如测熔点、沸点及色谱等验证。

色谱技术, 包括薄层色谱、纸层色谱、柱层色谱、气相色谱和高效液相色谱。对于化合物的分离、纯化和纯度鉴定等方面的应用, 越来越多, 越来越广泛。尤其是高效液相色谱 (HPLC), 它是以高科技为依托发展起来的一种新技术。它的特点是分离效率高; 分离速度快, 比经典的柱层色谱要快数百倍; 分析样品纯度所需样品量可少到 1mg 以内。HPLC 在有机化学、药物化学、生物化学和医学领域已广泛使用。

(2) 元素分析 通过分离提纯手段得到了纯化合物之后, 须进一步知道这种化合物是由哪几种元素组成的, 各元素的百分含量又是多少。只有确定了分子的元素组成及其百分含量才能进一步确定未知化合物的实验式和分子式。这就是元素定性和定量分析的目的。

(3) 确定分子式 实验式是最简单的化学式, 表示组成化合物分子的元素种类和各元素间原子的最小个数比。例如, 实验式 CH_3 , 就是指某化合物分子是由 C 和 H 两种元素组成, C 和 H 原子最小个数比为 1:3。实验式的计算方法是将各元素的质量分数除以相应元素的相对原子质量, 求出该化合物中各元素间原子的最小个数比例。即可得出该化合物的实验式。例如一化合物从元素分析得知含有 C、H、O 三种元素, 各元素的质量分数分别为碳 40.00%, 氧 53.34%, 氢 6.66%, 则该化合物的实验式为 CH_2O 。

实验式仅仅表示分子中各元素间原子个数比例, 一般并不代表分子中真正所含的原子数目。因此实验式不能代表化合物的分子式。只有在测定相对分子质量之后, 方能确定化合物的分子式。分子式与实验式是倍数关系。有时实验式就是分子式。例如, 实验式为 CH_2O 的化合物, 若测得的相对分子质量为 30, 则它的分子式也是 CH_2O ; 若测得的相对分子质量为 60, 则它的分子式为 $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$ 。如果测得的相对分子质量为 90, 则它的分子式为 $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}_3$ 。

过去测定化合物的相对分子质量通常采用沸点升高法和冰点降低法等经典的物理化学方法。现在测定相对分子质量的方法, 通常用高科技的质谱法替代了过去的经典方法。

(4) 结构式的测定 分子式相同, 结构式截然不同, 这种现象在有机化合物中屡见不鲜。因此, 确定了化合物的分子式之后, 还必须测定其结构式。过去, 通常是用经典的化学方法确定化合物结构式: 首先用有机化学反应证实化合物分子中存在的官能团; 然后在实验室用降解反应初步确定化合物的结构; 最后用有机合成方法在实验室合成该化合物, 以此确证化合物的结构。这种方法, 准确率低, 而且费时, 有时甚至要花费几年、几十年才能确定一个较复杂化合物的结构。近二三十年, 随着科学技术的发展, 化合物结构测定方法也发生了质的变化。目前, 主要是用红外光谱 (infrared spectroscopy, IR)、紫外光谱 (ultraviolet spectroscopy, UV)、核磁共振谱 (nuclear magnetic resonance, NMR) 和质谱 (mass spectroscopy, MS) 等波谱技术测定有机化合物的结构。其特点是样品用量少、快捷和准确