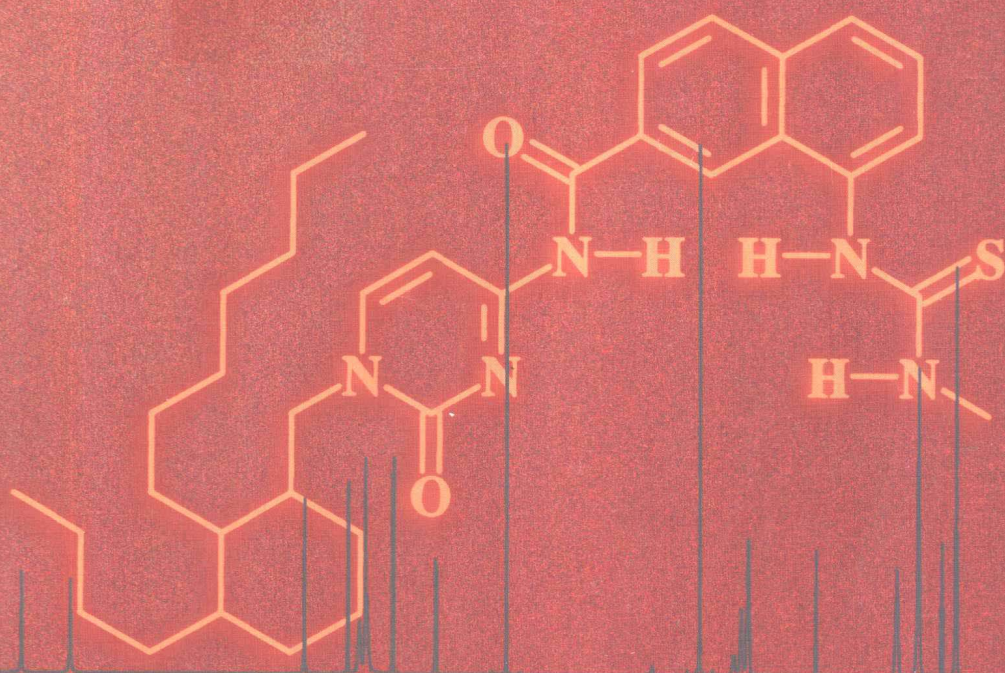


原著 / E.Pretsch P.Bühlmann
C.Affolter

波谱数据表

—— 有机化合物的 结构解析

荣国斌 译 朱士正 校



华东理工大学出版社

波谱数据表——
有机化合物的结构解析

Structure Determination of Organic Compounds
Tables of Spectral Data

原著 E. Pretsch P. Bühlmann C. Affolter

荣国斌 译
朱士正 校

本书为德国 Springer-Verlag GmbH & Co. KG 出版公司授权的独家简体中文译本,翻印必究。

图书在版编目(CIP)数据

波谱数据表:有机化合物的结构解析/(瑞士)普雷士(Pretsch, E.)等著;荣国斌译. —上海:华东理工大学出版社,2002.10

书名原文:Structure Determination of Organic Compounds Tables of Spectral Data

ISBN 7-5628-1323-X

I.波... II.荣... III.有机化合物-化学结构-波谱分析-数据 IV.0621.15

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 077002 号

Translation from the English language edition:

Structure Determination of Organic Compounds by E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter

Copyright © Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2000

Springer-Verlag is a company in the BertelsmannSpringer publishing group

All Rights Reserved

波谱数据表——有机化合物的结构解析

荣国斌 译
朱士正 校

出版	华东理工大学出版社	开本	787×960 1/16
社址	上海市梅陇路 130 号	印张	27.75
邮编	200237 电话 (021)64250306	字数	565 千字
网址	www.hdlgpress.com.cn	版次	2002 年 10 月第 1 版
经销	新华书店上海发行所	印次	2002 年 10 月第 1 次
印刷	常熟市华通印刷有限公司	印数	1-3000 册
ISBN 7-5628-1323-X/O·68		定价:30.00 元	

内 容 介 绍

本书是作者将各类有机化合物在 ^{13}C NMR、 ^1H NMR、IR、MS 和 UV/Vis 波谱中的图式数据分布予以归类总结而编纂成的一本手册类工具书。原著因其提供的各种数据和图式详实完整、编排合理,查阅方便而深受世界各国有机化学工作者和大学师生的欢迎。

本中译本是根据 2000 年出版的英文版翻译的,可供我国大专院校师生和有关科研工作者在解析有机化合物的结构问题时参考使用。

译校者的话

随着仪器分析的发展和进步,有机化合物的结构分析工作现在可以说主要是依靠红外光谱(IR)、核磁共振谱(NMR)、质谱(MS)和紫外/可见光谱(UV/Vis)这四大波谱技术了。这些波谱技术各自均能提供大量的图式和数据,做好结构解析工作也就是要将各种数据与分子的整体结构或片断结构准确无误地联系起来。这些数据的归类分布虽然也有其一定的规律,但是,分子结构的细微差别均能导致各类数据和图式的或多或少的不同。因此,即使对一个资深研究人员而言,也绝无可能记住所有这些数据和变化规律。同样,对初学者来说,相对而言,学习并掌握各种波谱分析的基本原理和使用方法较为容易做到,而能应用所得数据来解决分析问题或根据结构式就能推出并确定其精细的波谱数据则要困难得多。故而,如果手头拥有一本波谱数据手册,就像使用语言拥有一本词典一样,对我们的工作和学习都将是大有益处的。

《Structure Determination of Organic Compounds Tables of Spectral Data》一书是 Pretsch 等人根据自己在科研和教学工作中所积累的经验并结合文献,将各类有机化合物的四大波谱分析数据予以归纳整理而编纂成的。该书罗列的各种数据和图式详实完整,编排合理,查阅方便并有简要的文字说明。作为一本工具类手册,能够满足各类有机化合物结构解析工作的需要。因此,该书自 1976 年首版发行以来一直受到科研工作人员和大专院校师生的欢迎,先后出版了英、德、西班牙、俄、日等语种的版本。

现在读者看到的中译本是根据 2000 年出版的第 3 版(英语版)翻译而成的。在译校工作中我们尽量注意忠实于原著,但仍有少许校正,主要是:

1. 改正了原著中某些文字或图式数据表达上的差错;增加了一些缩写和符号条目。
2. 化学位移本是无量纲单位,但传统上和实际工作中人们仍习惯于用 ppm 来表示。为保持原著风格,译本也仍保留此用语。
3. 个别词汇目前尚无合适的中文译名,我们也加了一些说明。
4. 原书还附有光盘一张,是帮助解析小分子的核磁共振谱的,因版权问题,中译本未能列入。

除特别注明外,本书中红外光谱的数据是以波数表示的;质谱是以 m/z 表示的; ^1H 和 ^{13}C 的化学位移都是以 TMS 为标准而测得的;耦合常数的单位都是 Hz。我们希望,本书中译本的出版能很好地为中国读者在快速正确地解析有机化合物的波谱工作时提供方便,解决问题。

荣国斌(华东理工大学)

朱士正(中国科学院上海有机化学研究所)

2002.9 于上海

前 言

核磁共振谱和质谱的近代技术改变了获得数据的方法并大大扩展了这些方法的功能。然而,一些基本特性,如化学位移、耦合常数和碎片裂解途径并未改变。这也说明了本书以往几版是成功的。由于数据的总量正在历年增长,我们仍然决定编辑一个全新的版本。它的基本理念并未变化,即提供一套典型的有限的参考数据以解析 ^{13}C NMR、 ^1H NMR、IR、MS 和 UV/Vis 光谱。另一方面,本书也有一些改变。相关数据的总量至少翻了一番(特别对 MS 和 IR 而言),但各种谱学数据的排序和选择仍然采用相同的方法。

遗憾的是,我们的导师和同事 Simon W. 教授和 Clerc T. 教授已不再参与进来,Seibl J. 教授在几年前已经退休。他们对构筑本书的观念和在早期版本中所做出的贡献是无论怎样强调也不会过分的。我们同样要感谢许多以各种方式帮助我们完成书稿的同事。在此要特别提及 Wegmann D 博士,她在第一版的审读中纠正了不少差错和不协调的地方。特别的感谢还要给予提供基质材料 MALDI 质谱的 Knochenmuss R 博士(苏黎世高等理工学院)、在谱图数据系统提供帮助的 Hayamizu K 博士(国立材料和化学研究所 日本筑波,茨城)以及仔细审读部分书稿的 Jaun B 教授和 Badertscher M 博士(苏黎世高等理工学院)。

尽管我们在消除差错上已经作了很大努力和不少检查,看来还会有某些错误和不一致的地方。我们真诚地希望读者能给出使用本书时所产生的评论、建议或者任何问题,按下列地址和我们联系:

Prof Ernö Pretsch, Laboratory of Organic Chemistry, CH - 8092, Zürich, Switzerland, e-mail: Pretsch @ org.chem.ethz.ch. 或 Prof. Philippe Bühlmann, Department of Chemistry, University of Minnesota, 207 Pleasant St. SE, Minneapolis, NM 55455, USA, e-mail: buhlmann @ Chem.umn.edu.

苏黎世和东京 2000 年 8 月

目 录

1 引言	1
1.1 目标和编排	1
1.2 缩写和符号	3
2 概要表	5
2.1 一般表格群	5
2.1.1 从分子式计算双键相当数	5
2.1.2 某些原子核的性质	6
2.2 ^{13}C 核磁共振谱(^{13}C NMR)	7
2.3 ^1H 核磁共振谱(^1H NMR)	10
2.4 红外光谱(IR)	13
2.5 质谱(MS)	18
2.5.1 具精确质量数的天然存在元素的平均质量和有代表性的同位素相对丰度	18
2.5.2 一些元素的天然同位素丰度范围	24
2.5.3 天然存在的同位素类型	25
2.5.4 同位素分布的计算	26
2.5.5 各种氯、溴、硫、硅组合的同位素丰度	28
2.5.6 氯和溴组合的同位素类型	30
2.5.7 识别杂原子的存在	31
2.5.8 相对分子量(Mr)的测定规则	33
2.5.9 可用作结构类别标记的质量同系列	34
2.5.10 质量相关表	36
2.5.11 参考文献	46
2.6 紫外/可见光谱(UV/Vis)	47
3 组合表	49
3.1 烷烃、环烷烃	49
3.2 烯烃、环烯烃	50
3.3 炔烃	51
3.4 芳香烃	52
3.5 芳杂环化合物	53
3.6 卤代化合物	54
3.7 含氧化合物	56
3.7.1 醇和酚	56
3.7.2 醚	57
3.8 含氮化合物	59
3.8.1 胺	59

3.8.2	硝基化合物	60
3.9	硫醇和硫醚	62
3.10	羰基化合物	63
3.10.1	醛	63
3.10.2	酮	64
3.10.3	羧酸	65
3.10.4	羧酸酯和内酯	66
3.10.5	酰胺和内酰胺	68
4	^{13}C 核磁共振谱(^{13}C NMR)	71
4.1	烷烃	71
4.1.1	化学位移	71
4.1.2	耦合常数	80
4.1.3	参考文献	81
4.2	烯烃	82
4.2.1	化学位移	82
4.2.2	耦合常数	86
4.2.3	参考文献	87
4.3	炔烃	88
4.3.1	化学位移	88
4.3.2	耦合常数	89
4.3.3	参考文献	89
4.4	脂环化合物	90
4.4.1	化学位移	90
4.4.2	耦合常数	95
4.4.3	参考文献	95
4.5	芳香烃	96
4.5.1	化学位移	96
4.5.2	耦合常数	102
4.5.3	参考文献	103
4.6	芳杂环化合物	104
4.6.1	化学位移	104
4.6.2	耦合常数	111
4.7	含卤化合物	112
4.7.1	氟代物	112
4.7.2	氯代物	114
4.7.3	溴代物	115
4.7.4	碘代物	116
4.7.5	参考文献	116
4.8	醇、醚和相关化合物	117
4.8.1	醇	117
4.8.2	醚	119
4.9	含氮化合物	121
4.9.1	胺	121
4.9.2	硝基和亚硝基化合物	123
4.9.3	亚硝胺和硝胺	124

4.9.4	亚胺和脒	124
4.9.5	脲和碳化二亚胺	125
4.9.6	脒和异脒	126
4.9.7	异氰酸酯、硫代氰酸酯和硫代异氰酸酯	127
4.9.8	参考文献	127
4.10	含硫官能团	128
4.10.1	硫醇	128
4.10.2	硫醚	128
4.10.3	二硫醚和铈盐	130
4.10.4	亚砷和砷	130
4.10.5	磺酸、亚磺酸和它们的衍生物	131
4.10.6	亚硫酸、硫酸和它们的衍生物	131
4.10.7	硫羰基衍生物	132
4.11	羰基化合物	133
4.11.1	醛	133
4.11.2	酮	134
4.11.3	羧酸和羧酸盐	136
4.11.4	羧酸酯和内酯	138
4.11.5	酰胺和内酰胺	140
4.11.6	其它羰基衍生物	142
4.12	其它化合物	144
4.12.1	第IV族元素的衍生物	144
4.12.2	磷化物	145
4.12.3	其它有机金属化合物	147
4.13	天然产物	148
4.13.1	氨基酸	148
4.13.2	碳水化合物	152
4.13.3	核苷酸和核苷	154
4.13.4	甾体	156
4.14	溶剂和有关化合物的谱图	157
4.14.1	常见氘代溶剂的 ^{13}C NMR 谱	157
4.14.2	其它一些标准化合物的 ^{13}C NMR 谱	159
4.14.3	常见非氘代溶剂的混合 ^{13}C NMR 谱	160
5	^1H 核磁共振谱(^1H NMR)	161
5.1	烷烃	161
5.1.1	化学位移	161
5.1.2	耦合常数	166
5.1.3	参考文献	167
5.2	烯烃	168
5.2.1	取代乙烯	168
5.2.2	二烯	174
5.3	炔烃	175
5.3.1	化学位移和耦合常数	175
5.4	脂环化合物	176
5.5	芳香烃	180

5.6	芳杂环化合物	186
5.6.1	非稠合芳杂环化合物	186
5.6.2	稠合芳杂环化合物	193
5.7	卤代化合物	198
5.7.1	氟代物	198
5.7.2	氯代物	199
5.7.3	溴代物	200
5.7.4	碘代物	201
5.8	醇、醚和相关化合物	202
5.8.1	醇	202
5.8.2	醚	204
5.9	含氮化合物	207
5.9.1	胺	207
5.9.2	硝基和亚硝基化合物	210
5.9.3	硝胺、偶氮和氧化偶氮化合物	210
5.9.4	亚胺、肟、脞和连氮化合物	211
5.9.5	脲和异脲	212
5.9.6	氰酸酯、异氰酸酯、硫代氰酸酯和硫代异氰酸酯	213
5.10	含硫官能团	214
5.10.1	硫醇	214
5.10.2	硫醚	215
5.10.3	二硫醚和铈盐	216
5.10.4	亚砷和砷	216
5.10.5	磺酸、亚磺酸和亚硫酸、硫酸及衍生物	217
5.10.6	硫代羧酸酯衍生物	217
5.11	羰基化合物	218
5.11.1	醛	218
5.11.2	酮	219
5.11.3	羧酸和羧酸盐	220
5.11.4	酯和内酯	221
5.11.5	酰胺和内酰胺	223
5.11.6	其它羰基衍生物	226
5.12	其它各类化合物	228
5.12.1	含硅化合物	228
5.12.2	含磷化合物	229
5.12.3	其它化合物	232
5.13	天然产物	233
5.13.1	氨基酸	233
5.13.2	碳水化合物	236
5.13.3	核苷和核苷酸	237
5.13.4	参考文献	239
5.14	溶剂和参考化合物的谱图	240
5.14.1	常见氘代溶剂的 ¹ H NMR谱	240
5.14.2	其它一些标准化合物的 ¹ H NMR谱图	242
5.14.3	常见非氘代溶剂的混合 ¹ H NMR谱图	243

6	红外光谱(IR)	245
6.1	烷烃	245
6.2	烯烃	248
6.2.1	单烯烃	248
6.2.2	丙二烯烃	251
6.3	炔烃	252
6.4	脂环烃	253
6.5	芳香烃	255
6.6	芳杂环化合物	258
6.7	卤代化合物	260
6.7.1	氟代物	260
6.7.2	氯代物	261
6.7.3	溴代物	262
6.7.4	碘代物	262
6.8	醇、醚和相关化合物	263
6.8.1	醇和酚	263
6.8.2	醚、缩醛和缩酮	264
6.8.3	环氧化合物	266
6.8.4	过氧化物和氢过氧化物	267
6.9	含氮化合物	268
6.9.1	胺和相关化合物	268
6.9.2	硝基和亚硝基化合物	270
6.9.3	亚胺和肟	272
6.9.4	偶氮化合物	274
6.9.5	腈和异腈	275
6.9.6	重氮化合物	276
6.9.7	氰酸酯和异氰酸酯	277
6.9.8	硫代氰酸酯和硫代异氰酸酯	278
6.10	含硫官能团	280
6.10.1	硫醇和硫醚	280
6.10.2	亚砷和砷	281
6.10.3	硫羰基衍生物	283
6.10.4	硫代碳酸衍生物	283
6.11	羰基化合物	286
6.11.1	醛	286
6.11.2	酮	287
6.11.3	羧酸	290
6.11.4	酯和内酯	292
6.11.5	酰胺和内酰胺	295
6.11.6	酸酐	298
6.11.7	酰卤	300
6.11.8	碳酸衍生物	301
6.12	其它化合物	304
6.12.1	含硅化合物	304
6.12.2	含磷化合物	305
6.12.3	含硼化合物	308
6.13	氨基酸	309

6.14	溶剂、悬浮介质和干扰	310
6.14.1	常见溶剂的红外光谱	310
6.14.2	悬浮介质的红外光谱	311
6.14.3	红外光谱中的干扰谱带	312
7	质谱(MS)	313
7.1	烷烃	313
7.1.1	直链烷烃	313
7.1.2	支链烷烃	313
7.1.3	参考文献	314
7.2	烯烃	315
7.2.1	直链烯烃	315
7.2.2	支链烯烃	315
7.2.3	多烯和多炔	316
7.2.4	参考文献	316
7.3	炔烃	317
7.3.1	脂肪族炔烃	317
7.3.2	参考文献	317
7.4	脂环烃	318
7.4.1	环丙烷	318
7.4.2	饱和单环脂环烃	319
7.4.3	多环脂环烃	319
7.4.4	环己烯	319
7.4.5	参考文献	320
7.5	芳香烃	321
7.5.1	芳香烃	321
7.5.2	烷基取代的芳香烃	321
7.5.3	参考文献	322
7.6	芳杂环化合物	323
7.6.1	一般特征	323
7.6.2	咪唑	323
7.6.3	噻吩	323
7.6.4	吡咯	324
7.6.5	吡啶	324
7.6.6	吡啶和喹啉的 N-氧化物	325
7.6.7	哒嗪和嘧啶	325
7.6.8	吡嗪	326
7.6.9	吲哚	326
7.6.10	喹啉和异喹啉	326
7.6.11	1,2-二氮杂萘、2,3-二氮杂萘、1,3-二氮杂萘、 1,4-二氮杂萘	327
7.6.12	参考文献	327
7.7	卤代化合物	328
7.7.1	饱和脂肪族卤代物	328
7.7.2	多卤代烷烃	329
7.7.3	芳香族卤代物	329
7.7.4	参考文献	329

7.8	醇、醚和相关化合物	330
7.8.1	脂肪醇	330
7.8.2	脂环醇	331
7.8.3	不饱和脂肪醇	331
7.8.4	邻二醇	331
7.8.5	脂肪族过氧化氢	332
7.8.6	酚	332
7.8.7	苄醇	332
7.8.8	脂肪醚	333
7.8.9	不饱和醚	334
7.8.10	烷基环烷基醚	335
7.8.11	环醚	335
7.8.12	脂肪族环氧化物	336
7.8.13	甲氧基苯	337
7.8.14	烷基芳基醚	337
7.8.15	芳香醚	337
7.8.16	脂肪族过氧化物	337
7.8.17	参考文献	338
7.9	含氮化合物	339
7.9.1	饱和脂肪胺	339
7.9.2	环烷基胺	339
7.9.3	环胺(氮杂环烃)	340
7.9.4	哌嗪	341
7.9.5	芳香胺	341
7.9.6	脂肪族硝基化合物	341
7.9.7	芳香族硝基化合物	342
7.9.8	重氮化合物	342
7.9.9	偶氮苯	342
7.9.10	脂肪族叠氮化物	342
7.9.11	芳香族叠氮化物	343
7.9.12	脂肪腈	343
7.9.13	芳香腈	344
7.9.14	脂肪族异腈(RNC)	344
7.9.15	芳香族异腈(ArNC)	344
7.9.16	脂肪族氰酸酯(ROCN)	345
7.9.17	芳香族氰酸酯(ArOCN)	345
7.9.18	脂肪族异氰酸酯(RNCO)	345
7.9.19	芳香族异氰酸酯(ArNCO)	346
7.9.20	脂肪族硫氰酸酯(RSCN)	346
7.9.21	芳香族硫氰酸酯(ArSCN)	347
7.9.22	脂肪族异硫氰酸酯(RNCS)	347
7.9.23	芳香族异硫氰酸酯(ArNCS)	347
7.9.24	参考文献	348
7.10	含硫官能团	349
7.10.1	脂肪族硫醇	349
7.10.2	芳香族硫醇	349
7.10.3	脂肪族硫醚	350

7.10.4	烷基烯基硫醚	350
7.10.5	环硫醚	351
7.10.6	芳香族硫醚	351
7.10.7	二硫醚	351
7.10.8	脂肪族亚砷	352
7.10.9	烷基芳基亚砷和二芳基亚砷	352
7.10.10	脂肪族砷	353
7.10.11	环砷	354
7.10.12	烷基芳基砷	354
7.10.13	二芳基砷	355
7.10.14	芳香族磺酸	355
7.10.15	烷基磺酸酯	355
7.10.16	芳基磺酸酯	356
7.10.17	芳基磺酰胺	356
7.10.18	硫代羧酸硫代酯	357
7.10.19	参考文献	357
7.11	羰基化合物	358
7.11.1	脂肪醛	358
7.11.2	不饱和脂肪醛	358
7.11.3	芳香醛	358
7.11.4	脂肪酮	359
7.11.5	不饱和酮	359
7.11.6	脂环酮	359
7.11.7	芳香酮	360
7.11.8	脂肪族羧酸	360
7.11.9	芳香族羧酸	361
7.11.10	羧酸酐	361
7.11.11	饱和脂肪酸酯	361
7.11.12	不饱和酯	362
7.11.13	芳香族羧酸酯	363
7.11.14	内酯	364
7.11.15	脂肪族酰胺	364
7.11.16	芳香族羧酸酰胺	365
7.11.17	N-苯基酰胺	365
7.11.18	内酰胺	365
7.11.19	酰亚胺	367
7.11.20	参考文献	368
7.12	其它化合物	369
7.12.1	三烷基硅醚	369
7.12.2	烷基磷酸酯	369
7.12.3	脂肪族磷化物和磷氧化物	369
7.12.4	芳香族磷化物和磷氧化物	370
7.12.5	参考文献	370
7.13	常见溶剂和基质化合物的质谱	371
7.13.1	常见溶剂的电子轰击离子质谱	371
7.13.2	常用 FAB MS 基质化合物和校准化合物的谱图	374
7.13.3	常见 MALDI 质谱基质	

化合物的谱图	380
7.13.4 参考文献	383
8 紫外/可见光谱(UV/Vis)	385
8.1 吸收辐射波长和所见色彩的相关性	385
8.2 简单发色团的紫外/可见吸收光谱	385
8.3 共轭烯烃的紫外/可见吸收光谱	387
8.3.1 二烯和多烯烃的紫外吸收光谱	387
8.3.2 α, β -不饱和羰基化合物的紫外吸收光谱	388
8.4 芳香族化合物的紫外/可见吸收光谱	390
8.4.1 单取代苯的紫外吸收光谱	390
8.4.2 取代苯的紫外吸收光谱	391
8.4.3 芳香族羰基化合物的紫外吸收光谱	392
8.5 紫外/可见参考光谱	393
8.5.1 烯烃和炔烃的紫外/可见光谱	393
8.5.2 芳香族化合物的紫外/可见光谱	394
8.5.3 芳杂环化合物的紫外/可见光谱	399
8.5.4 其它化合物的紫外/可见光谱	401
8.5.5 核苷酸的紫外/可见光谱	403
8.6 常见溶剂的紫外/可见吸收光谱	404
主题索引(中英文对照)	405

1 引言

1.1 目标和编排

本数据的汇集是为了帮助在阐明和确认有机化合物结构时所用到的分子光谱的解析工作。它包括从 ^{13}C 和 ^1H 核磁共振谱(NMR)、红外(IR)、质谱(MS)和紫外/可见(UV/Vis)光谱中所得到的参考数据、谱图和经验相关式。它可被视为教材的补充和日常处理这些光谱技术的专用参考书目。使用本书解析谱图时只要求具备这些技术的基本原理知识,然而,其内容是考虑到对专家来说也是有用的一本参考书而组织的。

第2章和第3章包括结构单元中最具相关光谱特征的概要表和组合表。第2章是根据不同的光谱技术而组织的,第3章则为每组结构单元提供由各种技术所得到的谱学信息。这两章将帮助对谱图解析不太熟练的读者识别他们感兴趣的样品中所存在的结构单元。接下来的四章涵盖了从 ^{13}C NMR、 ^1H NMR、IR 和 MS 中得到的数据并且根据化合物类型都以同样的方式排列。它涉及各种骨架(烷、烯、炔、脂环、芳环和杂环),最重要的取代基(卤素、单键氧、氮、硫和羰基)及某些特殊的化合物族群(其它化合物和天然产物)。最后有常见溶剂、辅助剂(如基质材料和参照物)和在每个方法中经常会存在的杂质的光谱汇集。数据的排列严格有序,而且在每页的边上还有醒目的标志以帮助读者在各种光谱技术之间可以快速交叉参阅。虽然在近来,UV/Vis 光谱对结构解析所起作用已经不大,但其重要性随着高通量分析的出现也在增加。同样,在第8章中的参考数据对于联系光学传感器和在色谱及电泳中广为应用的 UV/Vis 检测器也是很有用的。

由于表格化数据的大部分来自于我们自己的测定结果或者是基于大量的文献数据,故完全的文献出处并未采用。只要有可能,数据基本上都起源于较通用的测量模式和条件。如,除非另外指出溶剂,NMR 化学位移总是用氘氯仿或四氯化碳为溶剂测定的。同样,红外光谱总是使用低极性的溶剂,如氯仿或二硫化碳而测量的。质谱数据则是由 70eV 的电子轰击离子化产生的。

在保留前期版本基本结构的同时也加入了许多新的东西。总的来看,数据的总量翻了一番。质谱(MS)部分是全新的,对各类化合物碎裂规律的汇集也是独特的。具新面貌的原型标准红外光谱也为每类化合物系统图

解式地展示了分析用的相关吸收带。早期版本的组合表已经扩展并被等排为两章,先根据峰位置后根据化合物族群而加以编组。