

# 有机化学

第2版

侯小娟 刘 华 主编



第四军医大学出版社



“十二五”职业教育国家规划教材  
经全国职业教育教材审定委员会审定  
供高职高专药学类专业及相关医学专业使用

# 有机化学

第2版

主编 侯小娟 刘 华  
副主编 杨晓明 彭炳华  
编者 (按姓氏笔画排序)  
于秋玲 (陕西能源职业技术学院)  
王 婷 (沈阳药科大学)  
刘 华 (江西中医药大学药学院)  
杨晓明 (平凉医学高等专科学校)  
张 红 (山西职工医学院)  
张鑫科 (汉中职业技术学院)  
侯小娟 (湖南医药学院)  
彭炳华 (湖南医药学院)  
廖秀英 (乐山职业技术学院)

第四军医大学出版社·西安

## 图书在版编目 (CIP) 数据

有机化学/侯小娟, 刘华主编. —2 版. —西安: 第四军医大学出版社, 2014. 8

“十二五”职业教育国家规划教材

ISBN 978 - 7 - 5662 - 0554 - 4

I . ①有… II . ①侯… ②刘… III . ①有机化学 - 高等职业教育 - 教材 IV . ①O62

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 134450 号

youjihuaxue

# 有机化学

出版人：富 明 责任编辑：张永利 崔宝莹

出版发行：第四军医大学出版社

地址：西安市长乐西路 17 号 邮编：710032

电话：029 - 84776765 传真：029 - 84776764

网址：<http://press.fmmu.edu.cn>

制版：新纪元文化传播

印刷：陕西奇彩印务有限责任公司

版次：2011 年 8 月第 1 版 2014 年 8 月第 2 版第 3 次印刷

开本：787 × 1092 1/16 印张：19.25 字数：460 千字

书号：ISBN 978 - 7 - 5662 - 0554 - 4 / 0 · 16

定价：39.00 元

版权所有 侵权必究

购买本社图书，凡有缺、倒、脱页者，本社负责调换

# 前　　言

为全面贯彻《教育部关于“十二五”职业教育教材建设的若干意见》(教职成〔2012〕9号)、《国家中长期人才发展规划纲要(2010—2020年)》等文件精神,深化“校企合作、工学结合”等有中国特色的现代职业教育教学改革以及适应新形势的发展需要,也为更好地服务于医药类高职高专药学专业人才培养,推动高职高专药学专业教育教学改革,我们依据《高等职业学校专业教学标准(试行)》、《药品管理法》、《国家基本药物目录》、《国家非处方药目录》,对本教材进行了修订。

有机化学是高职高专药学类专业的重要专业基础课程,是培养药学应用型人才的整体知识结构及能力结构的重要组成部分,同时它对学生学习后续课程起着至关重要的作用。本次教材修订力争体现“改革创新、精益求精”的特色,以贴近现实生活、贴近药学专业、贴近工作岗位为主线,以培养学生的学习兴趣和学习能力为根本,在继承传统学科内容的同时,适当引入学科前沿内容。在教材结构、内容取舍、编写风格上有所创新,坚持贯彻高职高专教材“实用为主、够用为度、应用为本”的基本原则,以符合学生的实际情况和专业、职业需要,体现工学结合和岗位对接。教材内容注重对学生实践能力的培养,以实际的工作任务为载体,实现理论与实践的有效融合。由于《药典》出新版、GMP新修订,还有新技术、新工艺和新材料等方面都有新发展,教材中涉及的部分内容也进行了更新。另外,对教材中的存在的错误进行了更正,增补了必要的图表,替换和修订了表现力不强的插图。各章节设置“课堂互动”“知识链接”“实例解析”“综合测试”模块,增加了教材的趣味性和实用性。

全书共十六章,分上、下两篇。上篇为理论知识,计划64学时,共十四章,按照官能团分类体系进行编写。下篇为实验指导,计划28学时,分两章,包括有机化学实验基础知识和十个实验项目。每章后附有综合测试,全书有两套模拟测试题,均附有参考答案,以供学生进行自我检测。随书制作了配套教学光盘,可供学生自学或教师教学使用。本书可作为高职高专药学类专业或其他医学相关专业的教材或教学参考书,也可供专业技术人员参考。

参加本书编写工作的有怀化医学高等专科学校的侯小娟(第一、十一章、模拟测试一),江西中医药大学药学院的刘华(第十章、实验六、七、八),平凉医学高等专科学校的杨晓明(第四、六章、模拟测试二),湖南医药学院的彭炳华(第十四、十五章),陕西能源职业技术学院的于秋玲(第七、九章),山西职工医学院的张红(第八、十二章、实验十),汉中职业技术学院的张鑫科(第二章、实验四、五、九),沈阳药科大学的王婷(第五、十三

章),乐山职业技术学院的廖秀英(第三章,实验一、二、三)。本次修订工作主要由主编和副主编完成。

本书在编写过程中得到了第四军医大学出版社的大力支持,在此表示衷心的感谢!由于我们的水平有限,书中难免有不妥之处,敬请同行专家和广大师生及其他读者批评指正。

侯小娟

2014年6月

# 目 录

## 上篇 理论知识

<b>第一章 绪论 .....</b>	( 2 )
第一节 有机化合物和有机化学 .....	( 2 )
第二节 有机化合物的结构 .....	( 4 )
第三节 研究有机化合物的一般步骤 .....	( 9 )
第四节 有机化合物的分类 .....	( 10 )
第五节 有机化学反应的基本类型 .....	( 12 )
<b>第二章 链烃 .....</b>	( 14 )
第一节 烷烃 .....	( 14 )
第二节 烯烃 .....	( 22 )
第三节 炔烃 .....	( 29 )
第四节 二烯烃 .....	( 34 )
<b>第三章 环烃 .....</b>	( 38 )
第一节 脂环烃 .....	( 38 )
第二节 芳香烃 .....	( 44 )
<b>第四章 卤代烃 .....</b>	( 61 )
第一节 卤代烃的分类和命名 .....	( 61 )
第二节 卤代烃的性质 .....	( 63 )
第三节 亲核取代反应和消除反应机制 .....	( 68 )
第四节 重要的卤代烃 .....	( 71 )
<b>第五章 醇、酚、醚 .....</b>	( 74 )
第一节 醇 .....	( 74 )
第二节 酚 .....	( 82 )
第三节 醚 .....	( 88 )
第四节 硫醇和硫醚 .....	( 93 )

第六章 醛、酮、醌	( 96 )
第一节 醛和酮	( 96 )
第二节 醚	( 111 )
第七章 羧酸及取代羧酸	( 117 )
第一节 羧酸	( 117 )
第二节 取代羧酸	( 124 )
第八章 旋光异构	( 130 )
第一节 旋光性	( 130 )
第二节 手性分子和对映异构体	( 132 )
第三节 旋光异构体的构型及其标记法	( 135 )
第九章 羧酸衍生物	( 142 )
第一节 羧酸衍生物的命名	( 142 )
第二节 羧酸衍生物的性质	( 144 )
第三节 重要的羧酸衍生物	( 149 )
第四节 碳酸衍生物	( 153 )
第五节 油脂	( 155 )
第十章 有机含氮化合物	( 160 )
第一节 硝基化合物	( 160 )
第二节 胺	( 164 )
第三节 季铵类化合物	( 173 )
第四节 重氮化合物和偶氮化合物	( 174 )
第五节 氨基酸	( 178 )
第十一章 杂环化合物和生物碱	( 185 )
第一节 杂环化合物	( 185 )
第二节 生物碱	( 200 )
第十二章 糖类	( 205 )
第一节 单糖	( 205 )
第二节 二糖	( 212 )
第三节 多糖	( 214 )
第十三章 萜类和甾族化合物	( 219 )
第一节 萜类	( 219 )

第二节 硫族化合物 .....	( 223 )
<b>第十四章 药用合成高分子化合物 .....</b>	<b>( 227 )</b>
第一节 高分子化合物概述 .....	( 227 )
第二节 高分子化合物的性质 .....	( 231 )
第三节 与药学有关的合成高分子化合物 .....	( 233 )
 下篇 实验指导	
<b>第十五章 有机化学实验基础知识 .....</b>	<b>( 242 )</b>
<b>第十六章 有机化学实验项目 .....</b>	<b>( 255 )</b>
实验一 熔点的测定 .....	( 255 )
实验二 蒸馏及沸点的测定 .....	( 257 )
实验三 旋光度的测定 .....	( 260 )
实验四 乙酸乙酯的制备 .....	( 261 )
实验五 乙酰水杨酸的制备 .....	( 263 )
实验六 正溴丁烷的制备 .....	( 265 )
实验七 乙酰苯胺的制备 .....	( 267 )
实验八 水蒸气蒸馏法提取薄荷油 .....	( 269 )
实验九 从茶叶中提取咖啡因 .....	( 270 )
实验十 常见有机化合物的性质 .....	( 272 )
<b>模拟测试卷 .....</b>	<b>( 277 )</b>
<b>参考答案 .....</b>	<b>( 283 )</b>
<b>参考文献 .....</b>	<b>( 297 )</b>

# **上篇 理论知识**

---

# 第一章 絮 论

## 学习目标

- ☆ 掌握:有机化合物及有机化学的概念;有机化合物的特性;有机化合物结构的几种表达方式;价键理论的有关概念及碳原子的杂化轨道。
- ☆ 熟悉:有机化合物的分类,共价键的断裂方式及有机反应的基本类型。
- ☆ 了解:共价键的参数,研究有机化合物的一般步骤。

## 第一节 有机化合物和有机化学

### 一、有机化合物和有机化学

有机化合物与人类的生产生活密切相关,早在几千年前,人类就知道利用、加工制造许多有机物,如酿酒、制醋、造纸,使用中草药治疗多种疾病,但这些有机物都是不纯的。直到18世纪末,人类才从动、植物中提取得到一些较纯净的有机物,如酒石酸、尿酸和乳酸等。但当时人们还不能从本质上认识有机物,对有机物在有机体内的变化缺乏足够的认识,当时的化学家们将有机物和无机物截然的划分开,把从矿物中得到的物质称为无机物,从生命体中得到的物质称为有机物。1806年,瑞典化学家柏则里(J. Berzelius)首先引用了“有机化学”这个名称,以区别其他矿物质的化学——无机化学,认为有机物是具有生命的物质,只能借助于有生命的动、植物得到,不能由简单的无机物制得。这就是所谓的“生命力”论,它严重地阻碍了有机化学的发展。

1828年,德国化学家维勒(F. Wohler)在实验室加热氰酸铵水溶液得到了哺乳动物的代谢产物——尿素;1845年,德国化学家柯尔柏(H. Kolber)合成了乙酸;1854年,法国人柏赛罗(M. Berthelot)合成了油脂。这一切都证明了人工合成有机物是完全可能的,从而打破了“生命力”论,人们不但可以利用简单的无机物合成与天然有机物相同的物质,还可以合成出比天然有机物性能更为优越的有机化合物。“有机”这一名词不再反映固有的含义,但因习惯一直沿用至今。

大量的证据表明,相同的基本科学原理适用于所有的化合物,有机化合物与无机化合物没有明显的界线,有机化合物的唯一特征是都含有碳元素。因此,可以认为有机化合物是“含碳的化合物”。又因多数有机物除含碳外,还含有氢元素,而氢原子可以被其他原子或原子团所取代,形成更加复杂的化合物,所以,常把碳氢化合物及其衍生物称

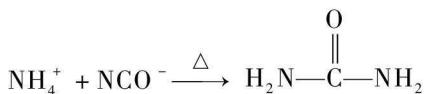
为有机化合物。有机化学就是研究碳氢化合物及其衍生物的组成、结构、性质、合成方法、分离提纯、变化规律及其应用的科学。



### Zhi Shi Lian Jie 知识链接

#### 有机合成第一人——维勒

维勒 1800 年出生于德国,十九岁时考入马堡大学医学院,一年后转学至海德堡大学,1823 年获得医学博士学位。毕业后在著名化学家贝采利乌斯的实验室工作了一年,后来相继在柏林、法兰克福等地任教。1824 年,维勒打算制造氰酸铵。按道理,若往氰酸中倒入氨水,便可以制得氰酸铵。当他往氰酸中倒入氨水之后,便用火慢慢加热,想把溶液蒸干,从而得到氰酸铵结晶体,然而却发现蒸发皿中出现了与以前的氰酸铵不同的无色针状结晶体。当时,维勒忙于其他的事情,来不及深究,一搁便是 4 年。1828 年,当维勒重新制得这种“氰酸铵”时,他经过仔细的分析研究,证明这种针状结晶是尿素。同年,他发表了《论尿素的人工合成》一文,引起了化学界的轰动。这被认为是第一次人工合成有机物,对当时流行的“生命力”论是巨大的冲击,并开创了有机合成的新时代。



## 二、有机化合物的特性

有机化合物与无机化合物之间虽然没有明显的界线,但是两者在性质上存在着显著的差异,有机化合物与无机化合物比较,一般具有以下特性:

1. 结构复杂、种类繁多 有机化合物的元素组成简单,种类却非常多,主要是它的结构复杂。有机化合物中的碳与碳之间可以有单键、双键、三键相连,双键、三键的位置也可以不同,还可以形成链状和环状等。因此,组成有机化合物的元素种类虽然很少,但有机化合物的种类却非常多。同分异构现象普遍存在。
2. 熔点较低 有机化合物的熔点一般不超过 400℃,而无机化合物一般熔点较高,难于熔化。
3. 难溶于水、易溶于有机溶剂 有机化合物一般极性较弱或无极性,而水的极性比较强,因此,有机化合物一般难溶于或不溶于水,易溶于乙醇、丙酮、乙醚等有机溶剂。
4. 不稳定、易燃 大多数有机化合物对热不稳定,受热容易分解,且易燃烧。燃烧生成 CO<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O 和分子中所含碳氢元素以外的其他元素的氧化物。
5. 一般是非电解质,溶解或熔融的状态下不导电 有机化合物中的化学键主要是共价键,且极性很小或无极性,难以电离成离子,所以,有机化合物一般为非电解质。
6. 反应慢、副反应多 无机物之间的反应主要是离子之间的重新组合,因此,反应

速率快,产物比较单一,一般没有副反应。而有机化合物反应时需要断裂共价键,反应速率较慢,一般需加热、搅拌或使用催化剂来加速。有机化合物结构复杂,反应常常不能局限在某一个特定的部位,易产生副反应,得到副产物。因此,有机化合物反应复杂,反应产物一般为混合物,要求对反应产物进行后处理,以分离提纯所需要的产物。

上述有机化合物的特性是就大多数有机化合物来说的,而不是绝对的。例如,四氯化碳不但不易燃烧,还可用作灭火剂;糖和乙醇极易溶于水;有的反应速率很快,可以以爆炸方式进行。

### 三、有机化学与药学的关系

药物制备、质量控制、储存、作用机制和体内代谢过程等都与有机化学密切相关,因为药物大多数是有机化合物。如合成药完全是由有机化学的合成方法制备的;抗生素虽以来自微生物为主,但也有合成或半合成品;生化药物来自动物组织;中药则主要来自植物和动物。而有机化合物作为药物,一般都要先用化学方法加工炮制、提取或精制,才能符合药用要求,特别是对于中药有效成分的研究,要经过提取、分离、结构测定、人工合成等实验步骤,所有这些研究程序,都离不开有机化学的基本理论和实验技能。因此,有机化学是药学类各专业的重要基础课程。

## 第二节 有机化合物的结构

### 一、有机化合物分子的化学键——共价键

有机化合物中都含有碳元素,碳原子的最外层有四个电子,它既不容易得到也不容易失去电子达到稀有气体稳定的电子构型,它往往通过电子对的共用来与其他原子相结合。因此,有机化合物分子中的化学键主要是共价键。

1. 价键理论 应用价键理论可以解释共价键的形成及本质。

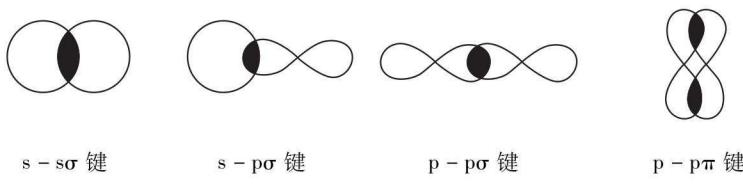
(1) 价键理论的基本要点:当两个原子互相接近到一定距离时,自旋方向相反的单电子相互配对,使电子云密集于两核之间,降低了两核间正电荷的排斥力,增加了两核对电子云密集区域的吸引力,使体系能量降低,形成稳定的共价键。每个原子所形成共价键的数目取决于该原子中的单电子数目,即一个原子含有几个单电子,就能与几个自旋相反的单电子形成共价键,这就是共价键的饱和性。当形成共价键时,原子轨道重叠程度越大,核间电子云越密集,形成的共价键越稳定。因此,共价键总是尽可能地沿着原子轨道最大重叠的方向形成,这就是共价键的方向性。

(2)  $\sigma$  键和  $\pi$  键:两个原子沿原子轨道对称轴方向“头碰头”重叠形成的键称为  $\sigma$  键,两个原子相互平行的 p 轨道从侧面“肩并肩”形成的键称为  $\pi$  键,如图 1-1 所示。



为什么具有下列分子式的分子不能存在?

- (1) CH<sub>5</sub>
- (2) C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>N
- (3) C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>Br<sub>2</sub>

图 1-1  $\sigma$  键和  $\pi$  键的形成

$\sigma$  键轨道的重叠程度最大,其电子云集中于两核之间围绕键轴呈圆柱形分布,任一成键原子围绕键轴旋转时,都不会改变两个原子轨道重叠的程度,因此, $\sigma$  键可以自由旋转。有机化合物分子中单键都是  $\sigma$  键。 $\pi$  键轨道的重叠程度较小,其电子云分布在键轴参考平面(节面)的上、下方,在节面上电子云几乎为零。由于  $\pi$  键没有轴对称性,当成键原子围绕键轴旋转时,则  $\pi$  键断裂,所以  $\pi$  键不能自由旋转。 $\pi$  键只能与  $\sigma$  键共存,在双键和叁键中,一个为  $\sigma$  键,其余为  $\pi$  键。由于  $\pi$  键的电子云不是集中在两个原子核之间,流动性大,受核的约束力小,易受外界影响而极化,故  $\pi$  键反应活性比  $\sigma$  键高。

2. 共价键的键参数 表征共价键性质的某些物理量,如键长、键能、键角、键矩称为键参数。键参数可以说明分子的一些重要性质。

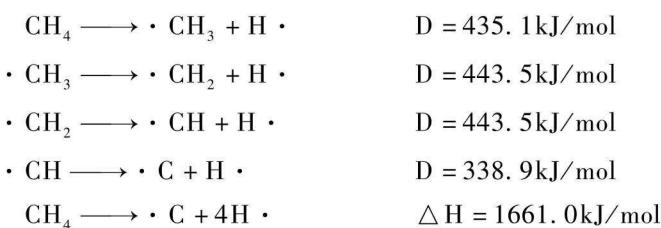
(1) 键长:是指分子中两个原子核间的平均距离,其单位常用 pm 表示。一般来说键长越短,表明电子云的重叠程度越大,共价键越稳定。同一种共价键在不同的化合物中键长会稍有差异。常见共价键的键长见表 1-1。

表 1-1 常见共价键的键长和键能

共价键	键长 (pm)	键能 (kJ/mol)	共价键	键长 (pm)	键能 (kJ/mol)
C—H	109	415	C=N	130	615
C—C	154	345	C≡N	116	889
C=C	134	610	C—Cl	176	339
C≡C	120	835	C—Br	194	285
C—O	143	358	C—I	214	218
C=O	122	744	O—H	96	463
C—N	147	305			

(2) 键能:是指 1 mol 气态 A 原子和 1 mol 气态 B 原子结合生成 1 mol 气态 AB 分子时所放出的能量。显然,使 1 mol 的气态双原子分子解离为气态原子所需要的能量也是键能,或称为键的离解能(D)。键能的单位是 kJ/mol。

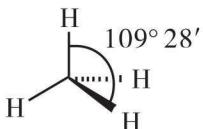
对于多原子分子,共价键的键能一般是指同一类共价键离解能的平均值。例如,从下面所列的甲烷四个 C—H 键的离解能的大小,可以看出这四个 C—H 键的离解能是不相同的。



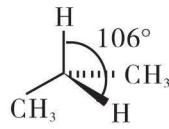
而 C—H 键的键能是四个共价键离解能的平均值,为  $1661/4 = 415.3 \text{ kJ/mol}$ 。

键能反映了共价键的强度,通常键能越大,键越牢固。常见共价键的键能见表 1-1。

(3) 键角:是指同一原子形成的两个共价键键轴之间的夹角。键角反映了分子的空间结构。同种原子在不同分子中形成的键角不一定相同,这是由于分子中各原子间相互影响的结果。



甲烷



丙烷

(4) 键的极性和可极化性:两个相同原子组成的共价键,成键电子对称地分布在两核周围,为非极性共价键,例如 H—H、Cl—Cl 键等。两个不同原子组成的共价键,由于两原子的电负性不同,形成极性共价键,成键电子非对称地分布在两核周围,电负性大的原子一端电子云密度较大,稍带负电荷,用  $\delta^-$  表示,另一端电子云密度较小,稍带正电荷,用  $\delta^+$  表示。例如



键的极性由偶极矩来度量,其定义为正电荷或负电荷中心上的电荷量( $q$ )与正负电荷中心之间距离( $d$ )的乘积:

$$\text{偶极矩 } \mu = qd$$

偶极矩是有方向性的,通常规定其方向由正到负,用箭头表示。偶极矩的单位为库仑·米(C·m),但一般习惯用德拜(D), $1\text{D} = 3.336 \times 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$ 。

分子的极性由分子的偶极矩度量。双原子分子中的偶极矩就是键的偶极矩,多原子分子的偶极矩是组成分子的所有共价键的偶极矩的矢量和。

可极化性又称极化度,它表示价键的电子云在外界电场的作用下,发生变化的相对程度。极化度除了与成键原子的结构和键的种类有关外,还与外电场强度有关。成键原子的体积越大,电负性越小,核对成键电子的约束越小,键的极化度就越大。例如,碳卤键的极化度次序为: $\text{C—I} > \text{C—Br} > \text{C—Cl} > \text{C—F}$ 。



比较下列各组共价键的极性和极化度的相对大小。

- (1) H—Br 和 H—I
- (2) O—H 和 S—H

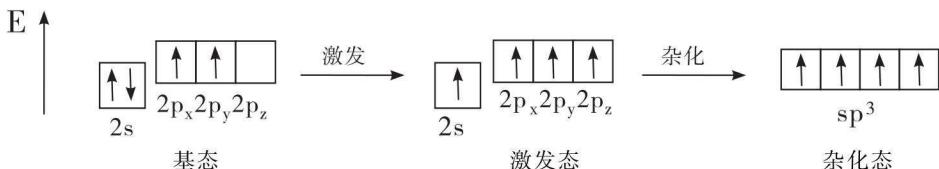
## 二、碳原子的杂化轨道

根据价键理论,碳原子的核外电子构型为  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$ ,碳的外层有两个未成对电子,只能形成两个共价键。这一推论与有机化合物中碳原子为四价和甲烷分子呈四面体结构等事实不相符。为了解释这一现象,鲍林等提出了杂化轨道理论,该理论认为原子在成键过程中,由于原子间的相互影响,同一原子中几个能量相近的原子轨道可以进行线性组合,重新分配能量和确定空间方向,组成数目相等的新的原子轨道,这种轨道

重新组合的过程称为杂化，杂化后形成的新的轨道称为杂化轨道。杂化轨道的方向性更强，成键能力更强。

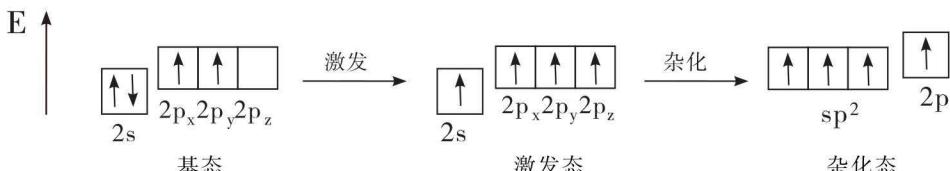
有机化合物中碳原子的杂化方式有以下三种：

1.  $sp^3$  杂化 碳原子成键时  $2s$  上的一个电子首先吸收能量激发到  $2p_z$  空轨道上，形成激发态，然后能量相近的  $2s$  和  $2p$  轨道重新组合，形成 4 个能量相同的  $sp^3$  杂化轨道。有机化合物分子中的单键碳原子均发生  $sp^3$  杂化。



每个杂化轨道中有  $1/4$  的  $s$  轨道成分和  $3/4$  的  $p$  轨道成分，其电子云形状是一头大，一头小，见图 1-2a。四个杂化轨道在空间的取向是指向正四面体的顶点，轨道间的夹角为  $109^\circ 28'$ ，见图 1-2b。

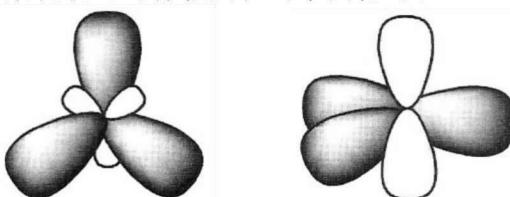
2.  $sp^2$  杂化 由碳原子激发态中的  $2s$  轨道和两个  $2p$  轨道重新组合，形成三个能量相同的  $sp^2$  杂化轨道。有机化合物分子中的双键碳原子一般发生  $sp^2$  杂化。



a.  $sp^3$  杂化轨道      b. 四个  $sp^3$  杂化轨道的空间构型

图 1-2 碳原子的  $sp^3$  杂化

每个杂化轨道中有  $1/3$  的  $s$  轨道成分和  $2/3$  的  $p$  轨道成分，三个  $sp^2$  杂化轨道的对称轴在同一平面上，轨道间的夹角为  $120^\circ$ ，空间构型为平面三角形，见图 1-3a。未参与杂化的  $2p$  轨道的对称轴垂直于  $sp^2$  杂化轨道对称轴所在的平面，见图 1-3b。



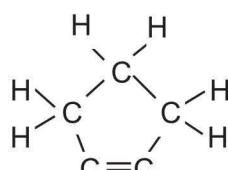
a.  $sp^2$  杂化轨道      b.  $sp^2$  杂化轨道和  $p$  轨道

图 1-3 碳原子的  $sp^2$  杂化

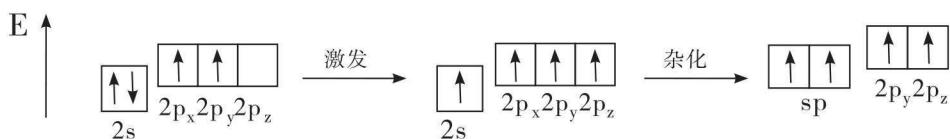
3.  $sp$  杂化 由碳原子激发态中的  $2s$  轨道和一个  $2p$  轨道重新组合，形成两个能量相



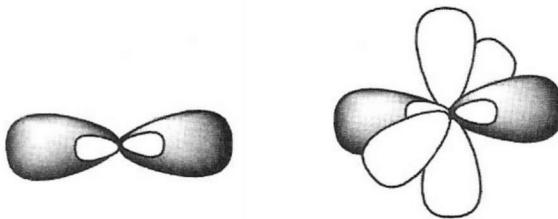
为什么从来没有人能制  
备出稳定的环戊炔分子？



同的 sp 杂化轨道。有机化合物分子中的叁键碳原子就是发生 sp 杂化。



每个杂化轨道中有  $1/2$  的 s 轨道成分和  $1/2$  的 p 轨道成分,两个 sp 杂化轨道对称轴呈直线形构型,键角为  $180^\circ$ ,见图 1-4a。两个未参与杂化的 2p 轨道与 sp 杂化轨道相互垂直,见图 1-4b。



### 三、有机化合物结构的表示方法

a. sp 杂化轨道

b. sp 杂化轨道和两个 p 轨道

图 1-4 碳原子的 sp 杂化

分子结构是指分子中原子相互结

合的顺序、方式及在空间的排列,它包括构造、构型和构象。不能用分子式来表示某一个有机化合物,因为同一个分子式往往有多种不同的结构。有机化合物中,分子组成相同,而结构不同的现象叫同分异构现象,具有同分异构现象的物质互称为同分异构体。有机化合物的同分异构现象很复杂,包括构造异构和立体异构。这里仅介绍几种构造的表示方法(表 1-2),空间结构的表示将在有关章节中讨论。

表 1-2 有机化合物构造的表示式

化合物	蛛网式	缩写式	键线式
正戊烷	<pre>       H   H   H   H   H                         H—C—C—C—C—H                           H   H   H   H     </pre>	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	
2 - 甲基丁烷	<pre>       H   H   H   H                     H—C—C—C—C—H                       H       C                       H       H     </pre>	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	
2 - 甲基 - 1 - 丁烯	<pre>       H   H   H   H                     H=C—C—C—C—H                       C       H                       H       H     </pre>	$\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$	
3 - 甲基环戊烯	<pre>       H   H             H—C—C—H                   H   C                   H   =C—H                   H   CH=CH_2     </pre>	$\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)$	

有机化合物的结构通常还使用各种模型来表示,最常用的模型有球棒模型、比例模型(又叫斯陶特模型)。甲烷分子的球棒模型和比例模型如图1-5所示。比例模型是按各种原子半径和键角以及键长比例设计出来的,可以更精确地表示分子中各原子的立体关系。中心原子上各个价键的三维空间结构常用楔线式表示,式中细线“—”表示该键在纸平面上,楔形实线“\”表示该键在纸面前方,虚线“\”或“/\”表示该键在纸面后方。



写出 $C_4H_{10}$ 所有构造异构

体的缩写式和键线式。



图1-5 甲烷分子的模型

### 第三节 研究有机化合物的一般步骤

研究一个新的有机化合物一般要经过下列步骤:

1. 分离提纯 研究一个新的有机物首先要把它分离提纯,保证达到应有的纯度。分离提纯的方法很多,常用的有重结晶法、升华法、蒸馏法、色谱分离法以及离子交换法等。有机化合物的纯度可通过测定物理常数和色谱法验证。
2. 元素的定性分析和定量分析 提纯后的有机化合物,就可以进行元素定性分析,确定它是由哪些元素组成的,接着进行元素定量分析,得出各元素的质量比,并进一步测定其相对分子质量。
3. 实验式和分子式的确定 根据定量分析的结果,通过计算就能得出该化合物的实验式。实验式是表示化合物分子中各元素原子相对数目的最简单式子,不能确切地表明分子的真实原子个数,必须根据相对分子质量才能确定分子式。
4. 结构式的确定 确定一个化合物的结构是一件相当艰巨而有意义的工作。测定有机化合物结构的方法有化学方法和物理方法。化学方法是把分子打成“碎片”,然后再从它们的结构去推测原来分子是如何由“碎片”拼凑起来的。现代物理方法如X-衍射、各种光谱法、核磁共振谱和质谱等,由于试样用量少,分析数据可靠,已成为研究有机化合物结构不可缺少的工具。在实际工作中,物理和化学方法常要结合起来,才能确定一个有机化合物的结构式。