

ASES/MS 质谱谱图集

中国科学院
大连化学物理研究所
色质谱数据库

ASES/MS 质谱图集

刘洪杨 人群伯 余发宇 余许李 建崇 文德岩 孙刘朱 国振文 强波模

中国科学院大连化学物理研究所
色质谱数据库

1988年8月

前 言

首先，我们要感谢我国质谱界同行的支持，这是《《ASES/MS 质谱谱图集》》得以问世的前提，同时，也是我们工作获得国家自然科学基金资助的基础。

《《ASES/MS 质谱谱图集》》是 ASES/MS 质谱数据库中部分数据，经整理后印出，分为质谱谱图，基峰索引和强度大于 70% 的第二强峰索引三个部分。数据主要来源于近期文献，经人工审核，手工转换，抄录，输入计算机，再由计算机加工处理，排版，印刷而成。由于订购数量少，制版费价格昂贵，只能采用轻印刷。出版数据集是一项艰苦细致，费时费力的工作，4000 余张质谱图的谱图集，耗时一年有余。

众所周知，不论采用人工检索还是计算机自动检索，错误的参考谱图，将导致不正确的结果，也给人们学习，归纳，总结质谱规律带来困难。现行国际流行的质谱数据库和数据集中，错误的谱图数据不少于 4%。我们在建立 ASES/MS 质谱数据库过程中，虽然已对期刊的原始数据作了认真的质量审查；对数据的转换，抄录，编辑和输入，作了反复地校对，然而，深感自己改正自己错误困难，错误之处肯定还有。诚恳希望各位同行，发现错误，随时给予指正，并通知我们，帮助我们提高谱图数据质量，更好地为大家服务。

编 辑 者

1988 年 8 月

使 用 说 明

1. << ASES/MS 质谱谱图集 >>中的谱图，按化合物分子量升序编排，每一化合物的信息包括序号，分子量，分子式，结构式，化学名称和质谱图。

序号	分子量	分子式	结构式	化学名称
496	148	C ₈ H ₁₂ O ₂		
<chem>CC(=O)T(C(=O)M)U4.</chem>				
2-ACETYL-CYCLOHEXANONE				



2. 有许多化合物的电子轰击质谱中无分子离子峰，附录提供了质谱基峰索引和强度大于 70% 的第二强峰索引。在不同仪器上，同一化合物的质谱可能会有明显的差异，因此，这两个索引可以帮助方便地鉴定质谱中无分子离子峰的化合物。

3. 化合物的结构式编码，为 ASES/MS 系统的线性编码，其基本结构符号和特性符号如下：

A. 基本结构符号

基本结构	符号	基本结构	符号
— CH ₃	M	$\equiv C \leq$	V
— CH ₂ —	V	$\equiv C \equiv$	Z
— CH —	T	$\equiv CH$	J
— C —	Q	$\equiv C —$	E
$\equiv CH_2$	W		
$\equiv CH —$	X		

*: a. 非表内结构元中的碳, 氢仍以 C, H 表示.

b. 其它化学元素及有机化学官能团均与有机化学相同.

B. 特性符号

E* 稠环及桥头原子 E. 当特别标有位置符号 <n> 时, * 省略.

E@ 螺原子 E.

..... 环状结构.

..... 稠环及桥环结构中, 视作“桥”的结构部分. 必要时标号于尖括号内 <n> 区别.

[.....]n n次重复单元.

(.....) 取代基及侧键.

<+> 表示 CIS-, BETA-, EXO-, Z-, 和 AXIAL 结构特征.

<-> 表示 TRANS, ALFA-, ENDO-, E- 和 EQUATORIAL 结构特征.

E(+), E(-) 离子性结构.

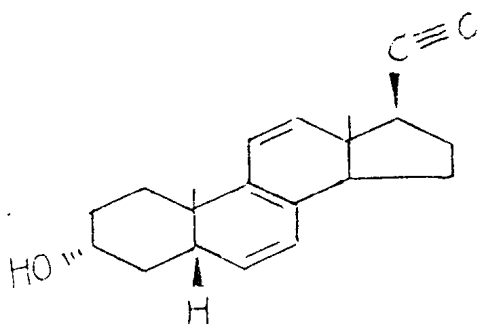
\$ 链型联结的两个环.

|| 配键结构.

C. 示例

结构式

线性结构码



.VVT(OH)<->VT*<+>Q*(H):XXY*Y*
:T*Q*(H)XX:VVT(KJ)<+>.

4. Appendix 1. , Appendix 2. 中的 BP, SP 分别表示基峰和强度大于 70% 第二强峰的质量, Spectrum Number 表示序号.

内 容 介 绍

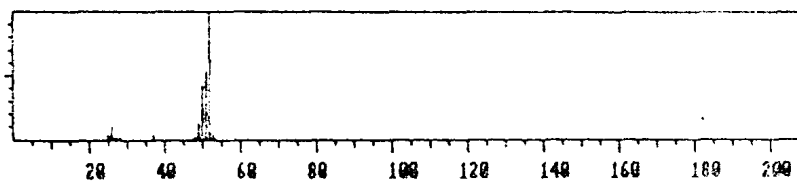
<< ASES/MS 质谱谱图集 >>, 为我所质谱数据库的部分数据, 经整理印出。它含有四千余张质谱谱图, 主要为近期文献质谱数据。谱图按化合物分子量升序编排, 每一化合物的信息包括序号, 分子量, 分子式, 结构式, 化合物名称和质谱图。书后附有基峰索引和强度大于 70% 的第二强峰索引。可作为有机化学, 分析化学方面的教学, 科研, 谱图解析的参考工具书。

中国科学院大连化学物理研究所
科学技术开发公司
协助发行

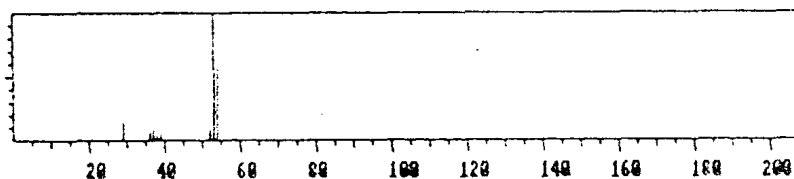
目 录

谱图	1
Appendix 1.	1223
Appendix 2.	1243

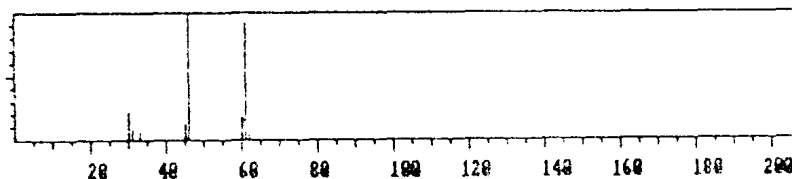
1 52 C4H4
XXXXX
BUTENYNE



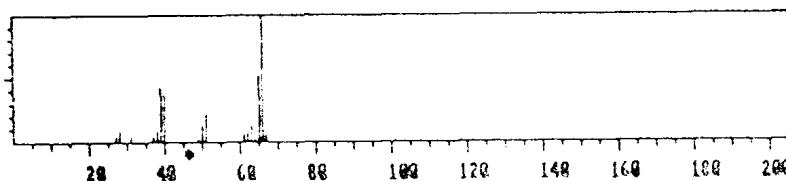
2 54 C3H2O
HC(O)XJ
PROPYNAL



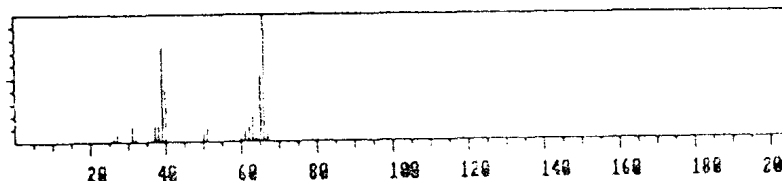
3 61 C2H7OM
HN(M)OM
METHYL-METHOXY-AMINE



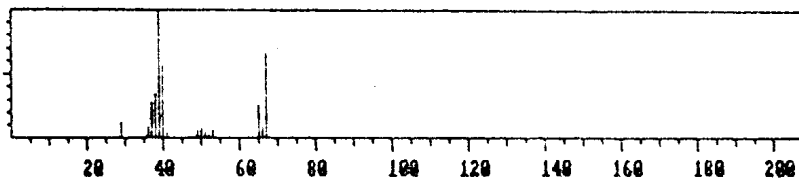
4 66 C5H6
HY(M)XJ
2-METHYL-BUTENYNE



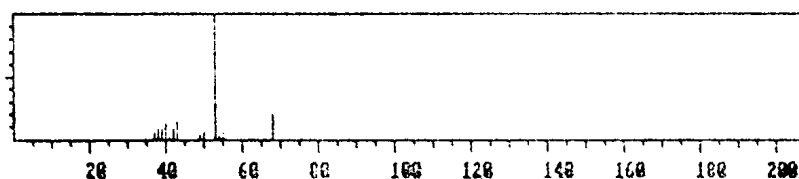
5 66 C5H6
XXXXX(M)
PENT-1-EN-3-YNE



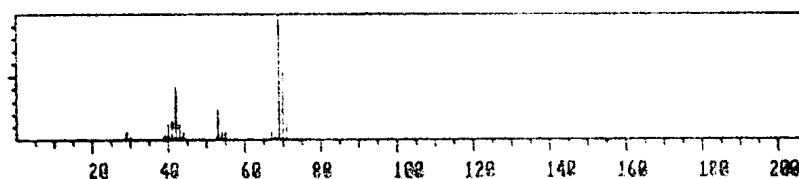
6 68 C4H4O
 NC(O)OCH
 2-BUTYNAL



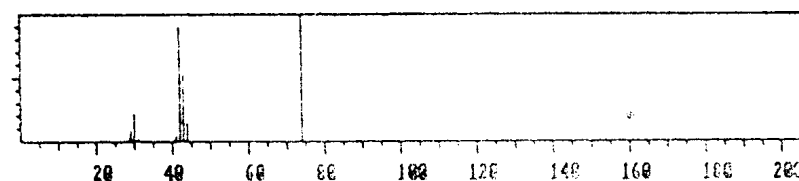
7 68 C4H4O
 JKC(O)H
 3-BUTYNE-2-ONE



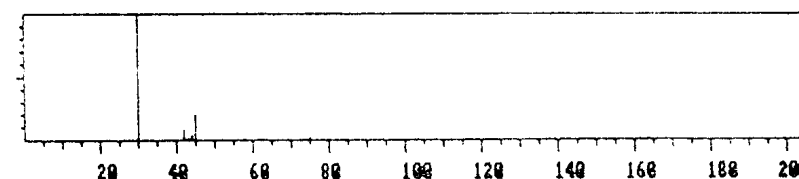
8 78 C3H6N2
 HCONH2
 DIMETHYL-CYANAMIDE



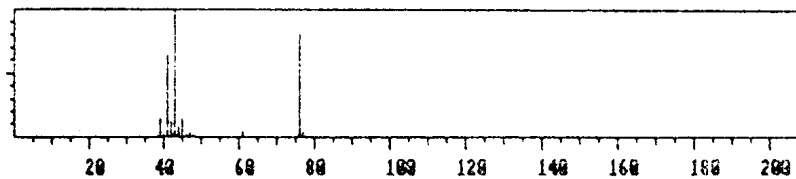
9 74 C2H6O2
 H2N(NO)
 DIMETHYL-N-NITROSO-ANINE



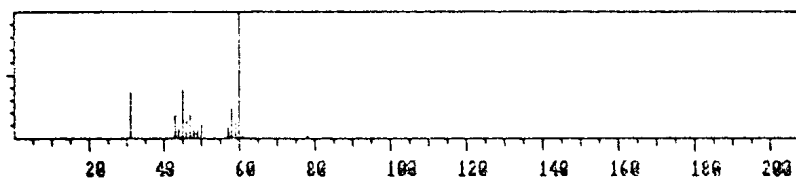
10 75 C3H5ON
 H2N(CH2)2
 2-METHOXY-ETHANAMINE



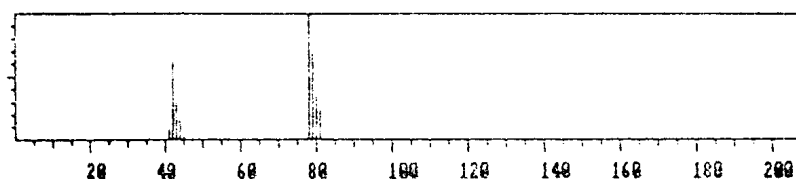
11 76 C3H9P
 H2P(TM2)
 ISOPROPYLPHOSPHINE



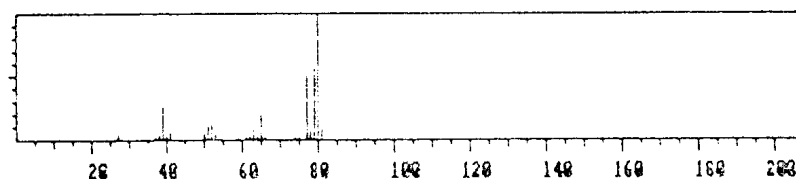
12 78 C2H7OP
 HOUP(VPH2)
 2-HYDROXYETHYLPHOSPHINE



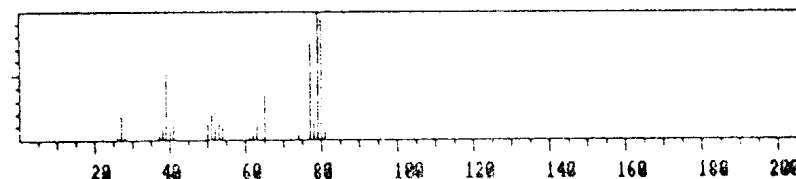
13 79 C2H6NC1
 H2NC1
 CHLORO-DIMETHYL-AMINE



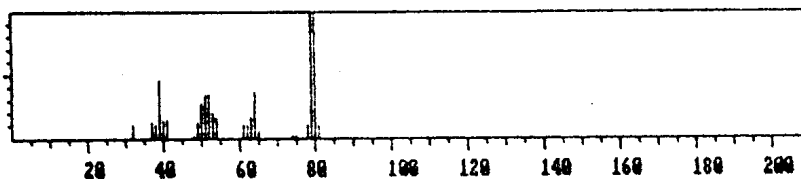
14 80 C6H8
 HX(M)XX(M)
 2-METHYL-PENT-1-EN-3-YNE



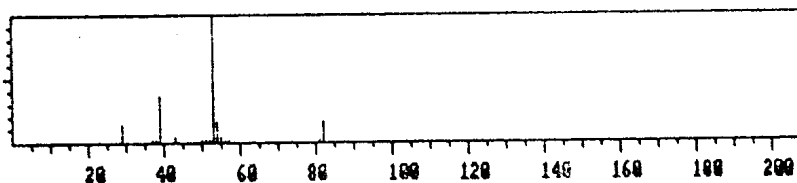
15 80 C6H8
 HXXX(UM)
 HEX-1-EN-3-YNE



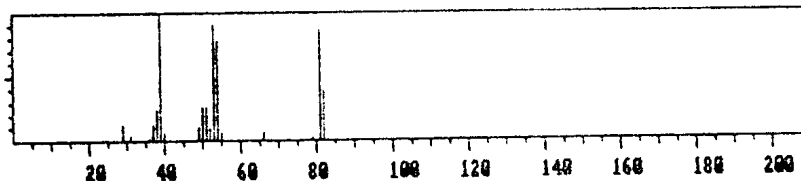
16 80 C6H8
JHY(N)XN
PENT-3-ENE-1-YNE, 3-METHYL-



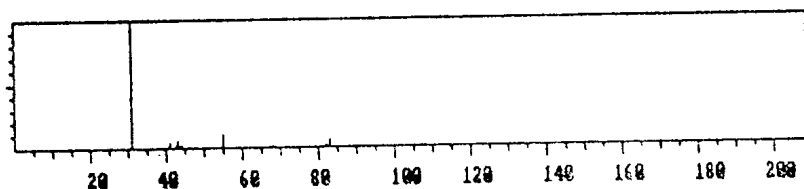
17 82 C5H6O
JHC(O)UN
1-PENTYNE-3-ONE



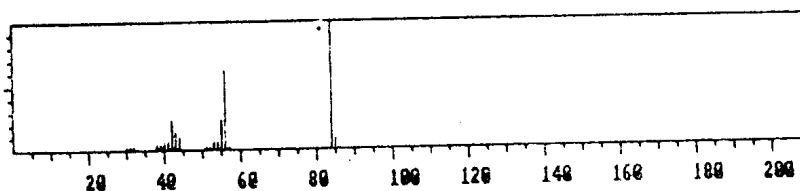
18 82 C5H6O
HC(O)KXN
2-PENTYNAL



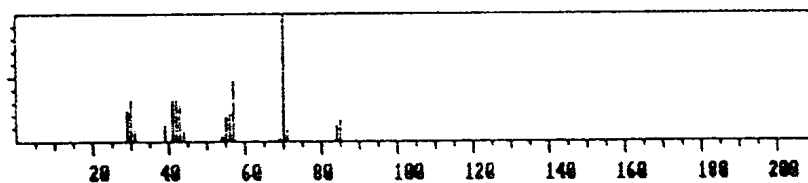
19 83 C5H9N
HY(N)UUU
2-METHYL-PYRROLINE



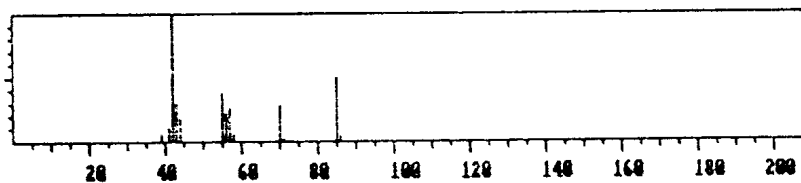
20 84 C3H4ON2
OY(NH2)NO2
2-AMINO-OXAZOLE



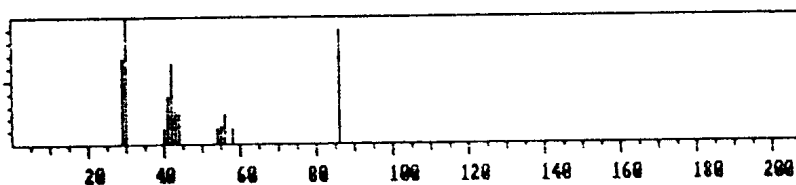
21 85 C5H11N
 N(H)I(N)U3.
 R(-)-2-METHYL-PYRROLIDINE



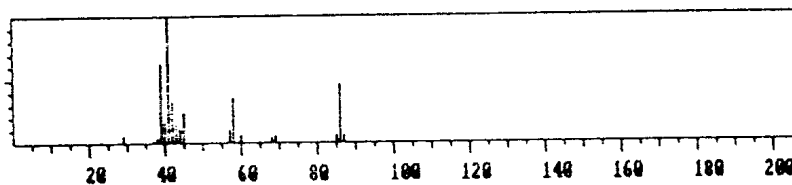
22 85 C5H11N
 N(H)I(N)U3.
 S(+)-1,2-DIMETHYL-AZETIDINE



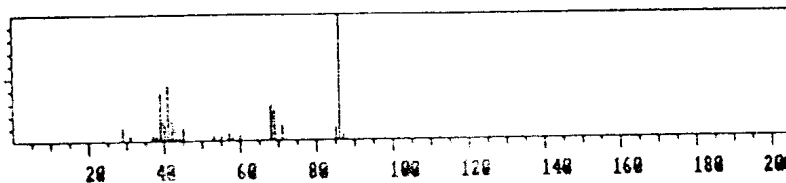
23 86 C3H6ON2
 N(HNO)U3.
 N-NITROSO-AZETIDINE



24 86 C4H6O2
 HOC(O)UXX
 BUT-3-ENOICACID



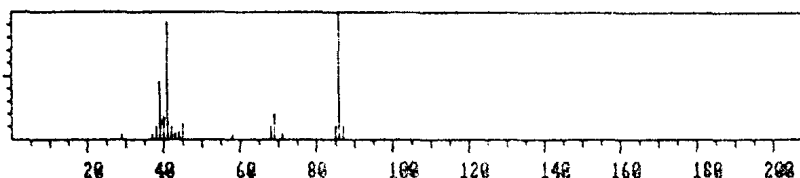
25 86 C4H6O2
 HOC(O)X(+)X(+)H
 CIS-CROTONICACID



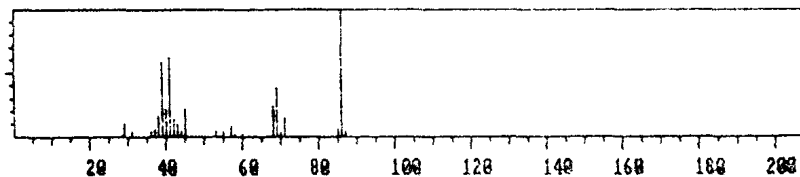
26 86 C4H6O2
 .T(C(O)OH)UU.
 CYCLOPROPANE-CARBOXYLICACID



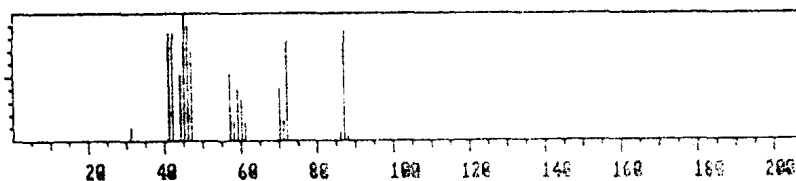
27 86 C4H6O2
 HOC(O)Y(N)M
 METHACRYLICACID



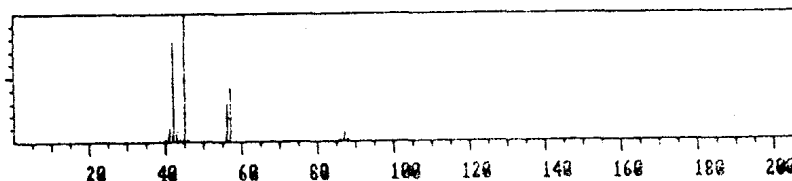
28 86 C4H6O2
 HOC(O)X(+)X(-)M
 TRANS-CROTONICACID



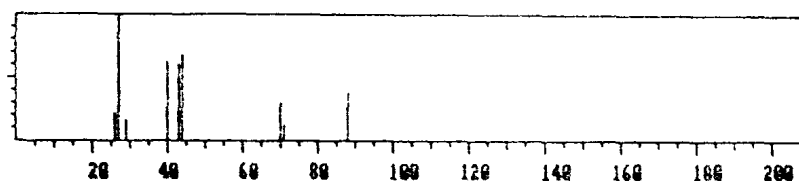
29 87 C3H6NP
 NCPM2
 DIMETHYL-CYANO-PHOSPHINE



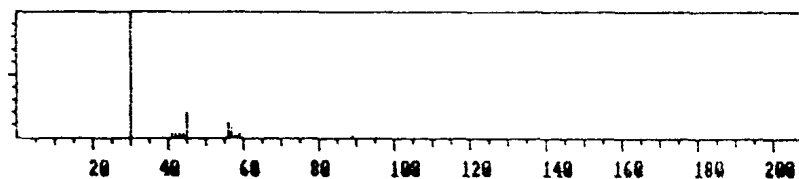
30 87 C4H9ON
 .N(UON)UU.
 N-(METHOXYMETHYL)AZIRIDINE



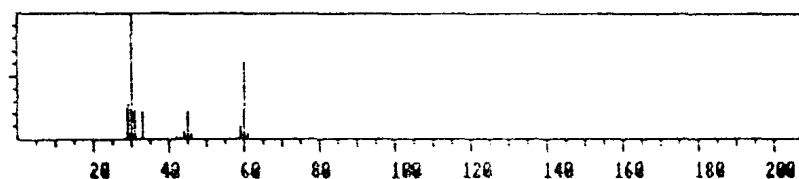
31 88 C2H4O2N2
 HOOC(OH)
 ETHAN-1,2-DIOXYDIOXIME



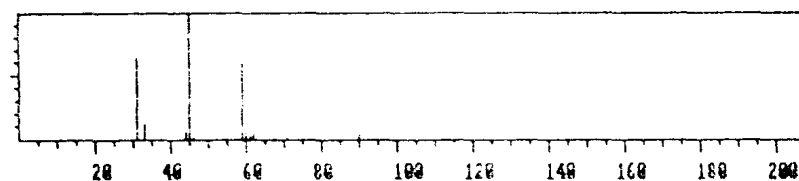
32 89 C4H11ON
 H2N(OH)
 3-METHOXY-PROPANAMINE



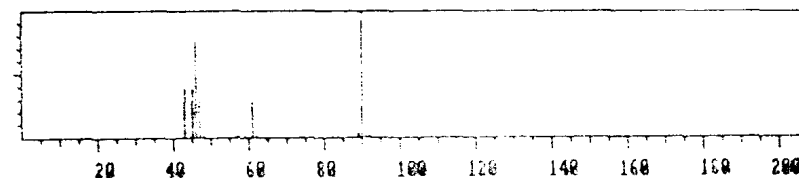
33 98 C2H6O2N2
 HN(NO)OH
 METHYL-METHOXY-N-NITROSO-AMINE



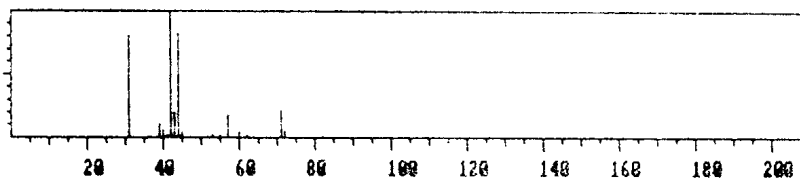
34 98 C3H6O3
 HOC(O)OH
 DIMETHYLCARBONATE



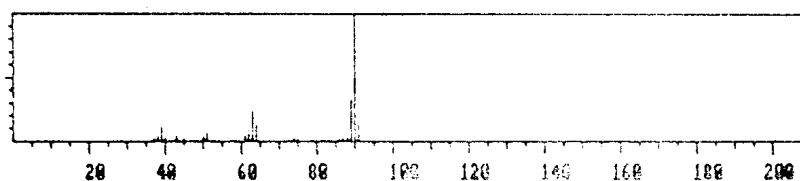
35 98 C3H6OS
 .SUT(OH)U.
 THIA-CYCLOBUTANE-3-OL



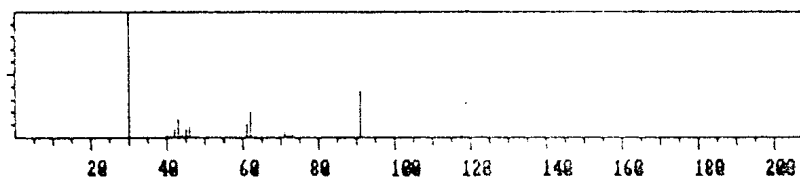
36 90 C4H10O2
 U(UOH)U(UOH)
 N-BUTANEDIOL-1,4



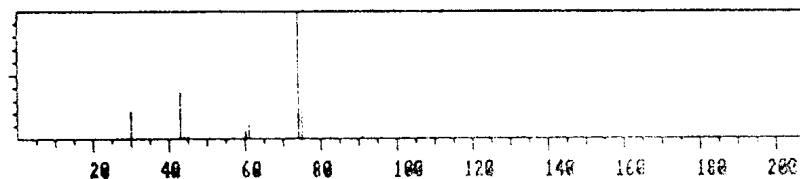
37 90 C7H6
 UY#4#X4
 CYCLOPROPABENZENE



38 91 C3H9NS
 H2M(U5M)
 2-METHYLTHTIOETHANAMINE



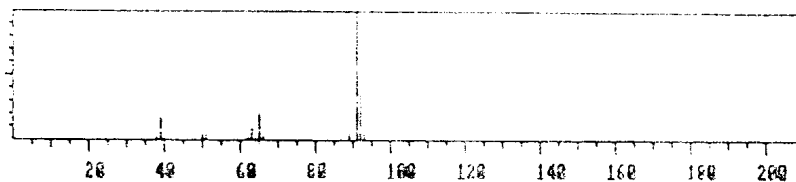
39 91 C3H9O2N
 M(UOH)OM
 METHYL-METHOXY-HYDROXYMETHYL-AMINE



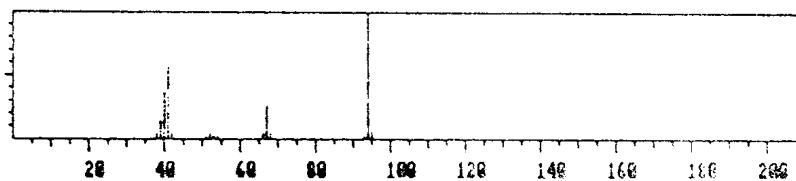
40 92 C3H9OP
 HOV(PM2)
 HYDROXYMETHYL-DIMETHYLPHOSPHINE



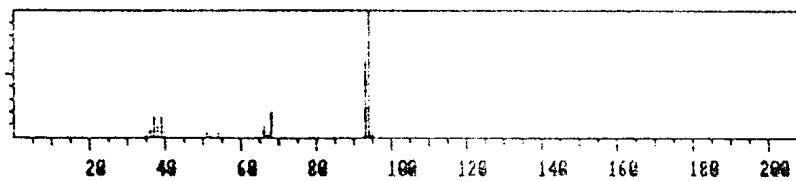
41 92 C7H6
 UXE
 CYCLOHEPTATRIENE



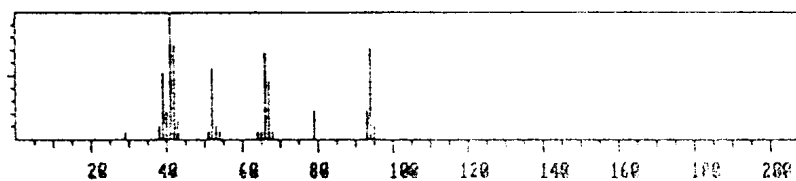
42 94 C5H6N2
 N(XH)XNOX
 1-VINYL-IMIDAZOLE



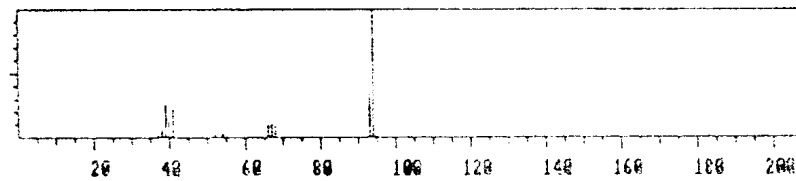
43 94 C5H6N2
 N(H)Y(XH)NO2
 2-VINYL-IMIDAZOLE



44 94 C5H6N2
 NOX(X,NOU.)
 3-ETHYLENIMINO-ACRYLONITRILE



45 94 C5H6N2
 N(H)XNY(XH)X
 4-VINYL-IMIDAZOLE



Mass spectrum of the sample showing relative intensity versus m/z . The base peak is at m/z 43. Other significant peaks are at m/z 29, 55, 67, 77, 91, 105, 121, 135, 151, 167, 183, 199, and 215.

Mass spectrum of the sample showing relative intensity versus m/z . The base peak is at m/z 43. Other significant peaks are at m/z 55, 67, 81, and 95.

Mass spectrum of the sample showing relative intensity versus m/z . The base peak is at m/z 41. Other significant peaks are at m/z 29, 55, 67, and 81.

Year	Percentage (%)
1960	45
1965	55
1970	75
1975	85
1980	90