

分析化学手册

[美] J.A. 迪安 主编

第8章 旋光性和旋光色散

8.1 概述	8.2
8.2 手性和旋光性	8.2
8.2.1 手性中心	8.2
8.2.2 对映体	8.2
8.2.3 非旋光手性化合物	8.2
8.3 旋光率	8.3
表 8.1 纯有机液体的旋光度	8.3
表 8.2 糖类和相关化合物的旋光度	8.5
表 8.3 天然氨基酸和相关化合物的旋光度	8.7
表 8.4 一些有机化合物的旋光度	8.9
8.4 旋光色散	8.18
8.5 圆二色性	8.18
8.6 ORD 和 CD 的关系	8.19
8.7 旋光度的测量	8.19
8.7.1 旋光计	8.19
8.7.2 旋光分光计	8.19
参考书目	8.20

8.1 概述

旋光性(或称光学活性)即光的偏振面旋转的性能,是许多有机化合物和某些无机络合物的特征。测量光旋转的角度是定量分析的一种经典方法。近年来,这种方法已经扩展到结构化学和立体化学,其中旋光色散法(测量平面偏振光的旋光率随光的波长而变化的方法)更是脱颖而出。

8.2 手性和旋光性

如果一个化合物不能与它的镜像叠合,则称为手性化合物(以前曾用不对称性这一术语)。手性化合物没有对称平面。手性元素有三种类型,即手性中心、手性轴和手性平面。每个手性化合物具有其中之一(或更多)。

8.2.1 手性中心

手性中心是最常见的手性元素。以不对称的碳原子为例,配位体围绕碳原子形成四面体排列。配位体是四个不同的原子或基团,其中之一可以是孤对电子。在亚砜中或带一个氮原子时就出现这种情况。乳酸分子是含有不对称(手性)碳原子的一个例子。

8.2.2 对映体

两个互为镜像的非叠合结构称为对映体。对映体相互之间的关系正如右手和左手的关系一样。除了偏振光平面转动的方向外,对映体的所有物理性质都相同。对映体具有相同的化学性质,只是它们用做旋光试剂的反应性能有所不同。

对映体以相反的方向使偏振光旋转,但其量值相等。如果光是以顺时针方向旋转,该试样具有右旋光性,以符号(+)表示。当试样使偏振光平面反时针方向旋转,显示出左旋光性,以(−)表示。早先的符号d和l(或D和L)现已不用。

8.2.3 非旋光手性化合物

虽然手性是旋光性必要的先决条件,但手性化合物并不一定是旋光性的。两种对映体的等量混合物,就观测不到净的旋光度。这类对映体的混合物认为是外消旋的,以符号(±)表示(不要用dl或DL)。

立体异构体的数目随着分子中手性中心数的增加而急剧增加。1个分子如果有2个手性原子,就应该有4个光学异构体,也就是由2对对映异构体组成4种结构。然而,如果化合物有2个手性中心,但这2个中心有相同的4个取代基接着,那么总的异构体数是3而不是4。这种化合物的1个异构体不是手性的,因为它和它的镜像是等同的,它有一

一个内镜面。这是非对映体的一个例子。非手性结构显示其是一种内消旋化合物。非对映体与光学活性的对映体相比，具有不同的物理和化学性质。

8.3 旋光率

旋光度是由光学活性化合物的各个分子所引起的。旋光度的量取决于光束在穿射过样品管的过程中有多少个分子被撞击。当对样品管的长度和样品浓度进行校准后，发现旋光度的量以及它的方向是每个光学活性化合物的特征。

旋光率是在 1dm 样品管中盛有含量为 1g/100mL 待测化合物时所观测到的旋光度的数值。对纯液体，以相对密度代替溶液的浓度

$$\text{旋光率} = [\alpha] = \frac{\text{观测到的旋光度}(\circ)}{\text{长度}(dm) \times (g/100mL)} \quad (8.1)$$

测量温度标在括号的右上角，所用光源的波长标在右下角。例如， $[\alpha]_{589}^{20}$ 表示测量温度在 20°C，使用 589nm 的光照射。常用的数据是由波长为 589nm 的钠 D 线测得的，如用别的波长则要在右下角标明。

旋光本领也可以用摩尔旋光度 $[\phi]$ （以前用 $[M]$ ）表示：

$$[\phi] = \frac{[\alpha] \times \text{相对分子质量}}{100} \quad (8.2)$$

溶剂效应往往是很小的，但当它影响解离态或构象时就可能变得非常大了。

温度对旋光度的影响通常是很小的，但当它影响化合物的结构时也可能会变得很大。特别是当处于平衡的两种结构会随温度而转变时更为明显。在糖类中这种平衡会引起变旋作用。每当 α 或 β 结构的样品溶解时，旋光度就会变化直到平衡的建立。表 8.2 中所列的糖类的旋光度值，编列成用箭头将起始值指到最终值。没有标明温度的数据皆指在室温下测得的。

表 8.1、表 8.2 和表 8.3 分别给出了纯有机液体的旋光度、糖类和相关化合物的旋光度以及天然氨基酸和相关化合物的旋光度。还选出了其他一些有机化合物的旋光度列于表 8.4。

表 8.1 纯有机液体的旋光度

化合物	相对分子质量	$[\alpha]$	温度/°C	波长/nm
(+)-2-溴丁烷	137.03	+10.8	25	
(-)-2-溴丁烷	137.03	-12.2	25	
(+)-2-溴辛烷	193.13	+27.5	17	
(-)-2-溴辛烷	193.13	-27.5	17	
2-溴丙酸	152.98	-27 +70	20 20	D ¹⁾ 400
(+)-2-丁醇	74.12	+13.52	27	D
(-)-2-丁醇	74.12	-13.51	25	D
(+)-乙酸仲丁酯	116.16	+25.4	20	

续表

化合物	相对分子质量	$[\alpha]$	温度/℃	波长/nm
(+)-香芹烯	150.21	+61.2	20	D
(-)-香芹烯	150.21	-62.46	20	D
(-)-二乙基羟基丁二酸	190.19	-10.2	20	
(+)-二乙基酒石酸	206.19	+7.5	20	
(-)-乙基乳酸	118.13	-10	14	D
(+)-葑酮	152.23	+66.9	20	D
(-)-葑酮	152.23	-51.2	16	D
		-77.2	18	546
		-154	18	436
(-)-2-庚醇	116.20	-10.48	17	D
(+)-2-羟基-2-丁酮	88.10	+4.5	20	671
		+8.0	20	546
		+17.6	20	436
		+57.3	20	340
(+)-12-羟基油酸	298.45	+6.67	22	D
(+)-荳烯	136.23	+85	22	671
		+123.8	19.3	D
		+136	22	546
		+233	22	436
(-)-荳烯	136.23	-103.1	19.3	D
(+)-里哪醇	154.24	+19.3	20	D
(-)-里哪醇	154.24	-20.1	20	D
(+)-N-甲苄胺	121.18	+40.3	22	D
(+)-3-甲基丁醛	86.13	+23.6	20	
(+)-3-甲基丁酸	102.13	+18.0	17	
1-甲基-2-丙基哌啶	141.25	+81	24	D
烟碱,尼古丁	162.23	-169	20	D
		-203	20	546
盐酸尼古丁 10% 水溶液	198.71	+104	20	D
(+)-2-辛醇	130.22	+7.5	20	671
		+9.89	20	D
		+26.2	20	382
(+)- α -盐酸蒎烯	172.71	+51.14	20	D
(-)- α -盐酸蒎烯	172.71	-51.28	20	D
(+)- β -蒎烯	136.23	+28.59		
(-)- β -蒎烯	136.23	-22.4		D
(+)-丙邻二胺	74.13	+29.7	25	
(-)-丙邻二胺	74.13	-28	25	
2-丙基哌啶(毒芹碱)	127.22	-14.2	23	D
硫羟乳酸	106.14	-45.5	15	
苧醇	154.2	+68	20	
(-)- α -苧酮	152.23	-19.2	20	D
(+)- β -苧酮	152.23	+72.5	15	D

1) 钠 D 线, 589nm.

表 8.2 糖类和相关化合物的旋光度 ($[\alpha]$ 值由 589nm 的钠 D 线测得)

化合物	相对分子质量	$[\alpha]$	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/°C
α -乙酰溴葡萄糖	411.21	+ 199.3 + 230	CHCl ₃ 苯	3 9	19 15
(+)- β -别吡喃糖(β -阿洛糖)	180.16	+ 0.58(4min) → + 3.26(10min) → + 14.41(20h, 最大)	水	6	20
(+)-阿卓吡喃糖(β -阿卓糖)	180.16	+ 32.6	水	7.6	20
(-)- β -阿拉伯糖	150.13	+ 173(6min) → + 105.1(22.5h)	水	3	12
(+)-阿糖醇	152.15	+ 7.7	饱和 Na ₂ B ₄ O ₇ 溶液	9.26	20
纤维素二糖	342.30	+ 14.2 → + 34.6(15h)	水	8	20
软骨素	355.31	+ 39	水		20
2-脱氧-(+)-葡萄糖	164.16	+ 38.5 → + 45.5(35min)	水	0.52	17.5
6-脱氧-(+)-葡萄糖(异鼠李糖)	164.16	+ 73(6min) → + 30(3h, 最终值)	水	8.3	20
2-脱氧-(+)-核糖	134.13	- 56.2(最终值)	水	1	22
果糖	180.16	- 132 → - 92(快速)	水	2	20
磷酸二氢-6-果糖	260.14	+ 2.5 + 1.2	水	3 0.9	21 21
(+)-岩藻糖	164.16	+ 127.0(7min) → + 89.4(31min) → + 76.0(146min, 最终值)	水	10	19
(-)-岩藻糖	164.16	- 124.1(10min) → - 108.0(20min) → - 75.6(24h)	水	9	20
(+)- α -半乳糖	180.16	+ 150.7 → + 80.2	水	5	20
(+)- β -半乳糖	180.16	+ 52.8 → + 80.2	水	4	20
(+)- α -半乳糖醛酸	194.14	+ 98.0 → + 50.9	水	10	20
(+)- β -半乳糖醛酸	194.14	+ 27 → + 55.6	水		20
α -龙胆二糖	342.30	+ 16(3min) → + 8.3(3.5h)		4	22
β -龙胆二糖	342.30	- 5.9(6min) → + 9.6(6h)	水	3	22
葡萄糖酸	196.16	- 6.7	水	1	20
葡萄糖胺	179.17	+ 100 → + 47.5(30min)	水	1	20
α -(+)-葡萄糖	180.16	+ 112.2 → + 52.7	水	10	20
β -(+)-葡萄糖	180.16	+ 18.7 → + 52.7	水	10	20
α -葡萄糖-1-磷酸盐	260.14	+ 120	水	1	25
α -葡萄糖-1-磷酸盐, 钾盐		+ 78	水	4	20
葡萄糖-6-磷酸盐, 钾盐	336.33	+ 21.2	水	1.3	24
(+)-葡萄糖醛酸	194.14	+ 11.7 → + 36.3(2h)	水	6	24
(+)-葡萄糖醛酸- γ -内酯	176.12	+ 19.8	水	5.19	25
(+)-甘油醛	90.08	+ 8.7	水	2	25
(-)-甘油醛	90.08	- 8.7	水	2	25

续表

化合物	相对分子质量	[α]	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/°C
糖原(高分子量聚合物)		+ 196 ~ + 197	水		25
(+)-古洛糖	180.16	- 20.4	水		20
(-)-古洛糖	180.16	+ 21.3	水	4.58	
(+)-艾杜糖	180.16	+ 15.8	水	2.3	13
(-)-艾杜糖	180.16	- 17.4	水	3.6	20
α -乳糖单水化合物	360.32	+ 92.6 → + 83.5(10min) → + 69(50min) → + 52.3(22h)	水	4.5	20
β -乳糖	342.30	+ 34(2min) → + 39(6min) → + 46(1h) → + 52.3(22h)	水	4	25
α -(+)-来苏糖	150.13	+ 5.5 → - 14.0	水	0.82	20
麦芽糖单水化合物	360.33	+ 111.7 → + 130.4	水	4	20
α -(+)-甘露糖	180.16	+ 29.3 → + 14.2	水	4	20
β -(+)-甘露糖	180.16	- 17.0 → + 14.2	水	4	20
β -(+)-甘露糖苯腙	270.3	+ 26.3 → + 33.8	吡啶		20
蜜二糖二水化合物	378.33	+ 111.7 → + 129.5	水	4	20
N-甲基- α -(+)-葡萄糖胺盐酸盐	228.68	- 103 → - 88	水	0.6	25
辛乙酰基- β -纤维素二糖	678.61	- 14.7	CHCl ₃	5	20
(+)-阿洛酮糖	180.16	+ 4.7	水	4.3	25
棉子糖五水化合物	594.54	+ 105.2	水	4	20
α -(+)-鼠李糖	164.16	- 7.7 → + 8.9	水	4	20
β -(+)-鼠李糖	164.16	+ 31.5(1min) → + 8.9	水	4	20
(+)-核糖	150.13	- 25	水	4	24
(+)-四羟基己二酸	210.14	+ 6.86 → + 20.60	水		19
山梨糖	182.17	- 2.0	水		20
(-)-山梨糖	180.16	- 42.7	水	5	30
蔗糖	342.30	+ 66.47 ~ + 66.49 + 78.3(546), + 128.4(436), + 309.5(302), + 541.2(284)	水	26	20
(+)-塔格糖	180.16	- 2.3	水	2.19	20
(+)-苏糖	120.10	- 12.3(20min, 最终值)	水	4	20
(-)-苏糖	120.10	+ 13.10(最终值)	水	4.5	20
海藻糖二水化合物	378.34	+ 178.3	水	7	20
土冉糖	342.30	+ 27.3 → + 75.8	水	4	20
木糖	150.13	+ 92 → + 18.6(16h)	水	10	20

表 8.3 天然氨基酸和相关化合物的旋光度

化合物	相对分子质量	[α]	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/℃
(-)-丙氨酸	89.09	+ 2.8 + 10.3(660), + 14.3(589), + 23.3(500), + 39.3(440)	水 3mol/L HCl	6 4.4	25 22
α -(-)-氨基丁酸	103.12	+ 8.40	水	4	16
α -(-)-氨基丁酸·盐酸	139.60	+ 12.90	水	3.64	19
β -(+)-氨基丁酸	103.12	+ 35.20	水		20
鹅肌肽	140.26	+ 12.3	水	5	30
(-)-精氨酸	174.20	+ 12.5 + 26.9	水 6.0mol/L HCl	3.5 1.65	20
精氨酸·盐酸	210.68	+ 12.0	水	4	20
(-)-天冬酰胺·盐酸	168.60	- 5.42 + 20.0	水 1mol/L HCl	1.3 (1mol)	20
(+)-天冬氨酸	133.10	- 23.0	6mol/L HCl	2.3	27
(-)-天冬氨酸	133.10	+ 25.0	6mol/L HCl	1.97	20
半胱氨酸	121.16	+ 9.8	水	1.3	30
(+)-半胱氨酸	140.30	+ 223	1.0mol/L HCl	1	20
(-)-半胱氨酸	140.30	- 223.4	1.0mol/L HCl	1	20
(-)-2,3-二氨基丙酸·盐酸	140.59	+ 25.3	1.0mol/L HCl	5	20
(+)-2,3-二氨基丙酸·盐酸	140.59	- 25.0	1.0mol/L HCl	5	20
(-)-3,5-二碘酪氨酸	432.97	+ 2.89 + 2.27	5g 4% HCl 5g 25% $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	0.246 0.227	20
(+)-3,3,4-三羟苯丙氨酸(多巴)	197.19	+ 13.0	1mol/L HCl	5.27	11
(-)-3,3,4-三羟苯丙氨酸	197.19	- 13.1	1mol/L HCl	5.12	13
(-)-谷氨酸	147.13	+ 31.4	6mol/L HCl	1	22.4
(+)-谷氨酸	147.13	- 30.5	6mol/L HCl	1	20
谷氨酰胺	146.15	+ 6.1	水	3.6	23
谷胱甘肽	307.33	- 21	水	2.74	27
组氨酸	155.16	- 39.74 + 47.6	水 HCl 水溶液	1.13 2	20
(-)-高丝氨酸	119.12	- 8.8 + 18.3	水 2mol/L HCl	5 5	26 26
羟基谷氨酸	163.14	+ 17.6 + 1.2	6mol/L HCl 水	2 2	20 20
顺式 4-羟基-(-)-脯氨酸	131.13	- 76.5 - 58.1	水	1 5.2	18
(-)-异亮氨酸	131.17	+ 11.29 + 40.61	水 6.1mol/L HCl	3 4.6	20 20

续表

化合物	相对分子质量	[α]	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/℃
(-) - 异缬氨酸	117.15	+ 11.13	水	5	25
(+) - 异缬氨酸	117.15	- 11.28	水	5	25
(-) - 亮氨酸	131.17	- 10.8	水	2.2	25
(-) - 赖氨酸	146.19	+ 14.6	水	6.5	20
		+ 25.9	6.0mol/L HCl	2	23
(-) - 蛋氨酸	149.21	- 8.2	水	1	25
		+ 19.3	1mol/L HCl	3.4	28
N-甲基-(-) - 色氨酸(红豆碱)	218.25	+ 44	0.5mol/L HCl	2.8	21
(-) - 正亮氨酸	131.17	+ 23.1	5mol/L HCl	4.25	20
		+ 6.26	水	0.7	20
(-) - 正缬氨酸	117.15	+ 23.0	20% HCl	10	20
(+) - 正缬氨酸	117.15	- 24.2	20% HCl	10	20
鸟氨酸	132.16	+ 11.5	水	6.5	25
鸟氨酸·2HCl		+ 16.6	水	5.3	23
(-) - 苯丙氨酸	165.19	- 35.1	水	1.94	20
(+) - 苯丙氨酸	165.19	+ 35.0	水	2.04	20
		+ 7.1	18% HCl	3.8	20
(-) - 脯氨酸	115.13	- 85.0	水	1	23.4
		- 52.6	0.50mol/L HCl	0.58	20
(-) - 丝氨酸	105.09	- 6.83	水	10	20
		+ 14.45	5.6mol/L HCl	0.5	25
(-) - 苏氨酸	119.12	- 28.3	水	1.1	26
(-) - 甲状腺素	776.93	- 4.4	0.13mol/L NaOH 于 70% 乙醇中	3%	20
(+) - 甲状腺素	776.93	+ 2.97(546nm)	6g0.5mol/L NaOH + 14gEtOH	0.74	21
(-) - 色氨酸	204.22	- 31.5	水	1	23
		+ 2.4	0.5mol/L HCl	1	20
(-) - 酪氨酸	181.19	- 10.6	1.0mol/L HCl	4	22
		- 13.2	3mol/L NaOH	4	18
(-) - 缬氨酸	117.15	+ 13.9	水	0.9	26
		+ 22.9	20% HCl	0.8	23

表 8.4 一些有机化合物的旋光度

化合物	相对分子质量	$[\alpha]$	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/℃
枞酸	302.44	-106	无水乙醇	1	24
(+)-顺、反-脱落酸	264.31	+411.10 +426.5	EtOH 0.0025mol/L H ₂ SO ₄ MeOH 溶液	1 1	20 20
(-)-顺、反-脱落酸	264.31	-426.2	0.0025mol/L H ₂ SO ₄	1	20
N ² -乙酰-(+)-谷氨酰胺	188.18	-12.5	水	2.9	20
(-)-乙酰肉碱	203.24	-19.52	水	6	20
(+)-N-乙酰蛋氨酸	191.26	+20.3	水	4	25
(+)-N-乙酰青霉素	191.25	+18	50% EtOH	1	25
乌头碱	645.72	+17.3	氯仿		
乌头碱硝酸盐	708.8	-35	水	2	20
腺(嘌呤核)苷	267.24	-58.2	水	0.658	9
(-)-3'-腺苷-磷酸	365.24	-41.6	水	1	22
(-)-5'-腺苷-磷酸(AMP)	365.24	-46.6	2% NaOH	2	22
腺苷三磷酸	507.21	-26.7	水	3.095	22
肾上腺(雄)甾酮	300.40	+300	CHCl ₃	1	20
松蕈(三)酸	416.56	-9.8	1mol/L NaOH	1	25
(-)-丙氨酸-(+)-氨基丙酸	160.17	-35.9	6mol/L HCl	2	22
白杆菌素	885.20	-7	丙酮	4	20
醛甾酮	360.45	+150	CHCl ₃	0.1	25
二羟孕二酮醋酸酯	390.52	+97	CHCl ₃	1.02	26
羟基孕(甾)二酮	332.49	+113.4	CHCl ₃	1.2	26
二羟孕酮	346.45	+95	CHCl ₃	0.81	23
别四氢皮(甾)酮	364.47	+94	1,4-二环氧己烷	1.45	25
鸭脚木碱	348.39	+141	水	0.4	25
N-烯丙基-3-羟基吗啡	283.40	-88.9	甲醇	3	20
N-烯丙基去甲吗啡	311.39	-155.3	甲醇	3	25
(+)-N-4-氨基苯谷氨酸	266.25	+16.7	0.1mol/L HCl	2	20
(+)-4-氨基-3-羟基丁酸	119.12	+18.3	水	2	20
(+)-氨基五酰胺	296.40	+98.9	甲醇	1	23
(-)-氨基五酰胺	296.40	-101.9	甲醇	1	23
(R)-(+)-1-氨基-2-(甲氨基-甲基)吡咯烷	130.19	+79	(纯)		18
(R)-(+)2-氨基-3-甲基丁醇	103.17	-16	乙醇	10	20
(+)-对映-2-氨基-1-(4-硝基苯)-1,3-丙二醇	212.21	-30	6mol/L HCl	1	25
(+)-6-青霉烷酸(6-APA)	216.26	+276.3	0.1mol/L HCl	1.2	22
羟氨基青霉素	365.42	+246	水	0.1	20
双霉素	1290.46	+7.5	水, pH 6	1	25

续表

化合物	相对分子质量	[α]	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/℃
两性霉素 B	924.11	+ 333	酸性二甲基甲酰胺(DMF) 0.1mol/L HCl 于甲醇中	1	24
		- 33.6		1	24
α -氨基苄青霉素	349.42	+ 281	水	1	21
扁桃苷	457.42	- 42	水	1	20
α -香树素	426.70	+ 91.6	苯	1.3	17
β -香树素	426.70	+ 99.8	苯	1.3	19
假木贼碱	162.24	- 83.1	水	1	20
甲孕烯醇酮(乙酸盐)	330.49	+ 24	CHCl ₃	1	20
(-)新烟草碱	160.21	- 177.8	水	1	17
雄(甾)烯二醇	290.43	- 55.5	2-丙醇	0.4	18
茴香霉素	265.30	- 30	甲醇	1	23
氨基霉素	315.32	+ 930	二甲基甲酰胺	1	25
除疟霉素	798.72	+ 225	氯仿	1.24	22
artimisinin	282.35	+ 66.3	氯仿	1.64	17
(-)抗坏血酸	176.12	+ 48	甲醇	1	23
重氮丝氨酸	173.13	- 0.5	水, pH 8.6	8.46	27.5
(-)二苯乙醇酮	212.22	- 118	丙酮	1.2	12
(+)二苯乙醇酮	212.22	+ 120.5	丙酮	1.2	12
生物素	244.31	+ 91	0.1mol/L NaOH	1	21
(+)-2-莰醇	154.24	+ 37.7	乙醇	5	20
3-溴代-(+)-樟脑	231.14	+ 122.7	苯, 100g	14.5	20
番木鳖碱	394.47	- 127	氯仿	1	
蟾蜍他灵	444.55	+ 5.4	氯仿	0.5	20
(+)-丁克吗	361.54	+ 218.5(HCl 盐)	甲醇	1	25
钙三醇	416.65	+ 48	甲醇	1	25
(+)-莰烯	136.23	+ 103.5	乙醚	9.67	17
(-)莰烯	136.23	- 119.11	苯	2.33	21
	152.23	+ 41 ~ + 43	美国药典乙醇	10	25
樟脑酸	200.23	+ 47 ~ + 48	乙醇	2.5	20
樟脑- β -磺酸	232.31	+ 21.5	水	4.3	20
碳霉素 A	842.00	- 58.6	氯仿	1	25
碳霉素 B	826.00	- 35	氯仿	1	25
3-蒈烯	136.24	+ 15	(纯)		20
(-)肉碱	161.20	- 23.9	水	0.86	30
(R)-()-香芹酮	150.22	- 58	(纯)		20
(S)-(+)-香芹酮	150.22	+ 58	(纯)		20
(+)-儿茶素	290.28	+ 16.0	水	1	21
吐根酚碱	466.60	- 43.4	氯仿	2	20

续表

化合物	相对分子质量	[α]	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/℃
查耳酮	162.18	+ 120(2min) → + 97(10min) → + 76(3h)	水	1.5	24
白屈菜碱	353.36	+ 117	氯仿	3	20
α -氯醛糖	309.54	+ 19	98%乙醇	5	22
氯霉素	323.14	+ 18.6	乙醇	4.86	25
3-氯-1-丁烯	90.55	- 2.52D(-)型 + 5.87L(+)型	(纯) (纯)		20 25
3-氯- α -樟脑	186.68	+ 96.1 内型 + 35 外型	乙醇 乙醇	5 5	20
绿原酸	354.30	- 35(半水合物)	水	2.8	26
叶绿素 a	893.5	- 262	丙酮		20
叶绿素 b	907.5	- 267	丙酮 + 甲醇		20
金霉素	478.88	- 275.0 - 240(盐酸化物)	甲醇 水		23 23
胆甾醇	386.64	- 31.5	乙醚	2	20
胆酸	408.56	+ 37	乙醇	0.6	20
辛可尼定	294.38	- 109.2	乙醇		20
辛可宁	294.38	+ 229	乙醇	0.6	20
柠檬酸	148.11	+ 23.6(+)型 - 23.4(-)型	水	3	22
香茅醛	154.24	+ 11.50	乙醇		25
β -香茅醇	156.26	+ 5.22(+)型 - 4.76(-)型	乙醇		20
柯卡因	303.35	- 16	氯仿	4	20
可待因	299.36	- 136 - 112	乙醇 氯仿	2 2	15 15
可待因氯氧化物	315.36	- 97.1(一水化合物)	水	2.1	18
秋水仙碱	399.43	- 121 - 429	氯仿 水	0.9 1.72	17 17
松柏苷	342.35	- 68	水	0.5	20
可的松	360.46	+ 209 + 269(546nm)	乙醇 苯	1.2 0.125	25 25
紫堇碱	369.44	+ 311	乙醇	0.8	20
铜蛋白	310.38	- 176	甲醇	1.8	17
磁麻糖	162.18	+ 54.7(24h)	水	3.2	20
胞(嘧啶核)苷	243.22	+ 31	水	0.7	25
2'-胞(嘧啶核)苷酸	323.19	+ 20.7	水	1	20
3'-胞(嘧啶核)苷酸	323.19	+ 49.4	水	1	20

续表

化合物	相对分子质量	[α]	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/℃
脱氢抗坏血酸	174.11	+ 56	水	1	20
脱碳秋水仙碱	371.42	- 129.0	氯仿	1	20
脱氧胆酸	392.56	+ 55	乙醇		20
脱氧皮质(甾)酮乙酸盐	372.49	+ 168 ~ + 175	1,4-二氧环己烷		20
脱氧双氢链霉素	567.62	- 102.5	水	1	20
右旋吗酰胺	392.52	+ 25.5	苯	5	20
二乙酰吗啡,海洛英	369.40	- 166	甲醇	1.49	25
二脱氧腺苷	235.25	- 25.2	水	1.01	25
二脱氧胞(嘧啶核)苷	211.22	+ 81	水	0.635	25
毛地黄糖	178.18	+ 109(15min; 546nm)	水	1.7	27
毛地黄皂苷配基	448.62	- 81	氯仿	1.4	19
毛地黄皂苷	1229.30	- 54	甲醇	2.8	20
毛地黄毒苷配基	374.50	+ 19	甲醇	1.36	25
毛地黄毒苷	764.92	+ 4.8	1,4-二氧环己烷	1.2	20
二氢可待因	301.37	- 72 ~ - 75(酸性酒 石酸盐)	水	1	25
二氢麦角胺	583.67	- 79(546nm)	吡啶	0.5	20
二氢吗啡	287.35	- 112(盐酸盐)	水	1.6	25
4,5-二氢乳清酸	158.11	+ 33.23(-)型 - 31.54(+)型	1% NaHCO ₃ 1% NaHCO ₃	1.992 2.01	25.3 25.3
去氧氟尿苷	246.20	+ 18.4	水	0.419	25
吐根碱	480.63	- 50	氯仿	2	20
肠杆菌素	669.57	+ 7.40	乙醇		25
麻黄碱	165.23	+ 62(+)-盐酸盐型, - 33 ~- 35.5(-)-盐酸盐型	水 水	0.8 5	20 25
肾上腺素	183.20	- 53.5	0.5mol/L HCl	5	25
麦角诺文	325.39	+ 90	水	1	20
麦角胺	581.65	- 160	氯仿	1	20
红霉素	733.92	- 78	乙醇	2	25
(+)-赤藓糖	120.11	+ 1 ~ - 14.5(3 d)	水	1	20
七叶苷	340.28	- 78.4(倍半水合物)	50% 1,4-二氧环己烷	2.5	18
雌(甾)酮	270.36	+ 152	氯仿	1	22
叶酸; 维生素 Bc	441.40	+ 23	0.1mol/L NaOH	0.5	25
烟曲霉素	458.53	- 26.6	乙醇	1	25
赤霉酸	346.37	+ 86	水	2.12	19
giractide	2218.75	- 51.4 ± 1.9	0.1mol/L 乙酸	0.472	23.5
(+)-海罂粟碱	355.42	+ 115	乙醇	3	20
葡萄糖胺	181.19	- 7.95	水	10	15

续表

化合物	相对分子质量	[α]	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/℃
葡萄糖内脂	178.14	+ 61.7	水	1	20
葡萄糖	179.17	+ 100 → + 47.5 (30min)	水	1	20
谷光甘肽	307.33	- 18.9	水	4.653	25
苯乙哌啶酮	217.26	+ 176 (+)型 - 181 (-)型	甲醇		20
			甲醇		20
甘氨酸胆酸	465.61	+ 30.8	乙醇	7.5	23
grandisol	154.25	+ 18.5	环己烷	1	21.5
灰黄霉素	352.77	+ 370	氯仿	饱和的	17
鸟(嘌呤核)苷	283.24	- 60.5	0.1mol/L NaOH	3	20
3'-鸟(嘌呤核)苷酸	363.23	- 65 - 8	5% NaOH 水	2 2	20 20
瓜拉那		+ 53	1mol/L NaOH		25
橙皮苷	610.55	- 76	吡啶	2	20
夹竹桃碱	382.44	- 91	氯仿	1.4	20
白毛茛碱	383.39	- 50	乙醇	0.3	20
3-羟基丁酸	104.10	+ 24.3	水	2.226	10
25-羟基胆甾醇	402.67	- 39.0	氯仿	1.05	25
β -羟基谷氨酸	163.14	+ 17.6	6mol/L HCl	2	20
17 α -羟孕(甾)酮	330.45	+ 105.6	氯仿	1.042	17
5-羟色氨酸	220.22	- 32.5 (-)型 + 16.0 (-)型	水 4mol/L HCl	1 1	20 20
天仙子胺	289.36	- 21.0	乙醇	1	20
肌苷; 次黄(嘌呤核)苷	268.23	- 49.2	水	0.9	20
5'-肌苷酸	348.22	- 18.5	2.5% HCl	3gBa 盐	20
菊酚	约 5000	- 40	水	2	20
碘五醇	777.09	- 2.01	水	10	20
碘番酸	570.93	- 5.2 (-)型 5.1 (+)型	乙醇 乙醇	2 2	20 20
(+) - 顺式- α -鸢尾酮	206.32	+ 109	二氯甲烷		20
(+) - 反式- α -鸢尾酮	206.32	+ 420	二氯甲烷		20
(+) - β -鸢尾酮	206.32	+ 59	二氯甲烷		20
(+) - 顺式- γ -鸢尾酮	206.32	+ 2	二氯甲烷		20
衣草酸	296.31	+ 9.94	乙醇	6.7	20
异帕米星	569.61	+ 110.9	水(焦硫酸盐水合物)	1	20
异抗坏血酸	176.12	- 16.6	水	1	16.5
异紫铆醇	666.77	+ 3	水	5%	20
isoflupredone	378.45	+ 108	乙醇	0.611	23
(-) 异谷氨酰胺	146.15	+ 20.5	水	6.1	21

续表

化合物	相对分子质量	[α]	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/℃
isoladol	273.32	-150(-)型	乙醇	0.952	20
异麦角酸	268.34	+281(二水化合物)	吡啶	1	20
异美舍东	309.43	+20.8(+) -20(-)型	(纯)		25
顺式-异毛果芸香素	286.32	+83.9	乙醇	1	20
异二甲基吗啡	311.37	+285	乙醇	1	18
isradipine	371.39	+6.7S(+) 型	乙醇	1.5	20
红藻氨酸	213.23	-14.8	水	1.01	24
胰激肽	1188.44	-57	1mol/L 乙酸	1	21
卡那霉素 A	484.51	+146	0.05mol/L H ₂ SO ₄	1	24
11-酮基黄体酮	328.46	+270	氯仿		25
(-)犬尿氨酸	208.21	-29(水合物)	水	0.4	20
(+)-乳酸	90.08	-2.6(546nm)	水	8	21.5
(-)乳酸	90.08	+2.6(546nm)	水	2.5	21~22
乳糖酸	358.30	+53.0→+22.6(6h)	水	8	20
乳果糖	342.30	-51.4(24h)	水, pH4.8	4	
羊毛甾醇	426.70	+62.0	氯仿	1	20
羊毛硫氨酸	208.24	+9.4(-)型	2.4mol/L NaOH	1.4	25
拉沙里菌素 A	590.80	-7.55	甲醇	1	25
鲁普利丁(抗癌药物)	1209.42	-31.7	1% 乙酸	1	25
左旋多巴	197.19	-13.1	1mol/L HCl	5.12	13
芸烯	136.23	+123.8(+) 型 -101.3(-)型	(纯)		19.5
里哪醇	154.24	-20.1(-)型 +19.3(+) 型	(纯)		19.5
林肯霉素	406.56	+137(HCl, 半水化合物)	水	1	25
左旋三碘甲状腺原氨酸	651.01	+21.5	33% 1mol/L HCl + 67% 乙醇	4.75	29.5
麦角乙酰	338.46	+31.3	吡啶	0.60	20
石胆酸	376.56	+33.7	乙醇	1.5	20
山梗碱	337.47	-43(-)型	乙醇	1	15
洛伐他汀	404.55	+323	乙腈	0.5	25
羽扇醇	426.70	+27.2	氯仿	4.8	20
麦角胺	267.32	15(546nm)	吡啶	0.5	20
麦角酸	268.32	+40	吡啶	0.5	20
苹果酸	134.09	-2.3(-)型	水	8.5	19
苯乙醇腈	133.14	43.75(+) 型	苯	5	25
二甲去氢孕酮	340.51	+79	氯仿	1	23
蜂毒素	2846.54	-89.52	水	0.409	21

续表

化合物	相对分子质量	[α]	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/℃
薄荷醇	156.26	-50	10%乙醇溶液	5.5	18
(-)薄荷酮	154.24	-24.8	乙醇	5.5	20
美舍东盐酸盐	345.90	-145(-)型 -169(-)型	水 乙醇	2.5 2.1	20
甲氧异丁嗪	328.46	-17	氯仿	5	20
(-)甲基多巴	211.21	-4.0(倍半水合物)	0.1mol/L HCl	1	20
甲基麦角诺文	339.42	-45	吡啶	0.4	20
N-甲基葡萄糖胺	195.22	-23	水	1	20
N-甲基- α -(<u>-</u>)-葡萄糖胺	193.20	-62	甲醇	1	25
α -甲基葡萄糖苷	194.18	+158.9	水	10	20
甲基脱氢皮(质甾)醇	374.46	+83	1,4-二氯环己烷	1	20
甲基睾(甾)酮	302.44	+69~+75	1,4-二氯环己烷	1	25
亚异样霉素	514.45	+100	水	0.5	20
吗啡	285.33	-132(一水化合物)	甲醇	1	20
盐酸吗啡	321.81	-113.5(三水化合物)	水	2.2(无 水化合物)	25
麝香酮	238.40	-13(-)型			17
诺龙	274.39	+55	氯仿	0.93	23
那可托灵	399.39	-189	氯仿(20cm 管)	0.4	20
新霉素	322.4	+112.8	水	1	20
β -可待因;尼奥品	299.36	-28(氯溴酸盐)	氯仿	7.5	23
乙基西梭霉素;奈替米星	475.60	164	水	3	26
尼古丁;烟碱	162.23	+104(盐酸盐)	水	10	20
尼伐地平	385.38	+222.42(+) -219.62(-)型	甲醇 甲醇	1 1	20
尼莫地平	418.45	+7.9(+) -7.93(-)型	1,4-二氯环己烷 1,4-二氯环己烷	0.439 0.374	20
去甲肾上腺素	169.18	-37.3(-)型	水+1mol/L HCl	5	25
炔诺酮	298.41	-31.7	氯仿	1	20
甲基炔诺酮	312.44	-42.5(-)型	氯仿	1	25
去甲烟碱	148.20	-89	水	100	22
降假麻黄碱	151.20	+37.9(+) -63.0	甲醇 乙醇	3 1	20 24
新生霉素	612.65	-10	冰乙酸	1	25
制霉菌素		-14 3S 型 +16 3R 型	甲醇 甲醇	0.19 0.34	25 24
昂丹司玉;枢复宁	293.37	-125(盐酸盐)	水	2.5	20
氯可酮	315.36	-196.6(二水化合物)	0.1mol/L HCl	1	25
土霉素	460.44				

续表

化合物	相对分子质量	[α]	溶剂	浓度/(g/100mL)	温度/℃
全内脂	130.14	-50.7(-)型	水	2.05	25
泛酸	219.23	+37.5	水		25
仲山梨酸	112.12	+210	乙醇	2	19
青霉胺	149.21	-63(盐酸盐)	1mol/L NaOH	1	25
苄星青霉素 G	909.11	+206(水合物)	甲酰胺	0.105	25
二苯甲胺基	517.63	206	水	1	20
哈胶青霉素 G	1265.79	+115.3	氯仿	10	25
青霉素 G 钾	372.47	+285~-+310	水	0.7	22
青霉素 N	359.40	+187(钡盐)	水	0.6	20
青霉素 V	350.38	+223(钾盐)	水	0.2	25
2-戊烯基青霉素钠	334.37	+316	水	0.88	15
戊味二氮草	268.27	+76.4	水	1	25
紫苏醛	150.21	+127	CCl ₄	13.1	20
α -水芹烯	136.23	-217(-)型 +86.4(+)型	(纯) (纯)		20 16
β -水芹烯	136.23	+65.2(+)型 -51.9(-)型	(纯) (纯)		20 20
苯丁酰脲	206.24	+54.0(+)型	乙醇	1	17
根皮苷	436.40	-52(二水化合物)	乙醇	3.2	25
毒扁豆碱	275.34	-76	氯仿	1.3	17
木防己苦毒素	602.57	-29.3	乙醇	2.31	16
毛果芸香碱	208.25	+106 +91(盐酸盐)	水 水	2 2	18 18
β -蒎烯	136.23	+28.59			
匹味青霉素	463.55	+196	水	1	20
脱氢皮(质甾)醇	360.44	+102 +116(21-乙酸盐)	1,4-二氧环己烷	1	25
脱氢可的松	358.44	+186(21-乙酸盐)	1,4-二氧环己烷	1	25
α -(+)-普洛帕吩咐	339.48	+59.8(盐酸盐)	水	0.6	25
原藜芦碱 A	794.0	-40.5	吡啶	1	25
原藜芦碱 B	810.0	-37	吡啶	1	25
假可卡因	303.35	+42	氯仿	5	20
长叶薄荷酮	152.23	-22.5	(纯)		23
除虫菊酯 I	328.4	-14	异辛烷	1	20
除虫菊酯 II	372.4	+14.7	异辛烷-乙醚	1	19
(-)焦谷氨酸	129.11	-11.9	水	2	20
皂皮酸	486.67	+56.1	吡啶	2.9	20
羧唑(恶唑)青霉素	416.42	+183.5	水	1	23