

3.2.27 物理性质数据库

数据库介绍: 本数据库目前收录了多种常见化合物的物理性质数据, 包括了熔点、沸点、折射率、偶极矩和密度。同时还收录了大量的化合物计算性质。用户可通过性质数据进行化合物筛选。

检索方式与示例:

1)物理性质实验值检索 物理性质实验值检索, 如图 3.2.27.1, 进入页面后可以浏览所有近 5000 种化合物的物理性质实验值。

当前位置: [物质性质数据库](#) -> [实验数据检索](#) [化合物结构检索](#) [物理性质\(计算值\)检索](#) [返回](#)

熔点(°C): - 沸点(°C): - 折射率: - 偶极矩: - 相对密度: -

所有结果均按 熔点 从小到大 排序。

序号	名称	分子式	CAS号码	熔点(°C)	沸点(°C)	折射率(20°C)	折射率(25°C)	偶极矩	相对密度(20°C)	相对密度(25°C)
1	甲烷 methane	CH4	74-82-8	-182.45	-162.15			0		
2	乙烷 ethane	C2H6	74-84-0	-182.75	-88.6			0		
3	丙烷 propane	C3H8	74-98-6	-187.65	-42.05	1.2862 ^S	1.2814 ^S	0	0.50039 ^S	0.4927 ^S
4	正丁烷(烷) n-butane(butane)	C4H10	106-97-8	-138.35	-9.50	1.3294 ^S	1.3259 ^S	0	0.57861 ^S	0.57281 ^S
5	2-甲基丙烷(异丁烷) 2-methylpropane(isobutane)	C4H10	72-28-5	-159.61	-11.72			0.13	0.5572 ^S	0.5510 ^S
6	正戊烷(烷) n-pentane(pentane)	C5H12	109-66-0	-129.73	36.07	1.3575	1.3547	0	0.6262	0.6213
7	2-甲基丁烷 2-methylbutane	C5H12	78-78-4	-159.9	27.85	1.3537	1.3509	0.1	0.61967	0.61462
8	2,2-二甲基丙烷 2,2-dimethylpropane	C5H12	463-82-1	-16.57	9.50	1.342 ^S	1.339 ^S	<0.05	0.5910 ^S	0.5851 ^S
9	正己烷(己烷) n-hexane(hexane)	C6H14	110-54-3	-95.32	68.74	1.3749	1.3723	0	0.65933	0.65484
10	2-甲基戊烷 2-methylpentane(isohexane)	C6H14	107-83-5	-153.66	60.27	1.3715	1.3687		0.65315	0.64852

[下一页](#) [最后一页](#) 当前页码: 1/498, 10条纪录/页

图 3.2.27.1 物理性质实验值

输入熔点从 85-105, 沸点从 200-250 (例 1), 检索结果如图 3.2.27.2。

熔点(°C): 85 - 105 沸点(°C): 200 - 250 折射率: - 偶极矩: - 相对密度: -

所有结果均按 熔点 从小到大 排序。

序号	名称	分子式	CAS号码	熔点(°C)	沸点(°C)	折射率(20°C)	折射率(25°C)	偶极矩	相对密度(20°C)	相对密度(25°C)
1	1,4-二溴苯 1,4-dibromobenzene	C6H4Br2	106-37-6	87.3	218.5			0	2.26117	0.9641 ^{99.6}
2	2,5-二甲基-2,5-己二醇 2,5-dimethyl-2,5-hexanediol	C8H18O2	110-03-2	92	214				0.898	
3	木糖醇 xylitol	C5H12O5	87-99-0	93.5	216					
4	2,3,5-三甲酚 2,3,5-trimethylphenol(isopseuodocumenol)	C9H12O	697-82-5	95.5	233					
5	3-甲氧基苯乙酮(3-乙酰基苯乙醚) 3-methoxyacetophenone(3-acetyl anisole)	C9H10O2	586-37-8	95.5	240			2.88		0.998 ¹³¹
6	顺-二甲基丁烯二酸酐 3,4-dimethyl-2,5-furandione(dimethylmaleic anhydride,pyrocinchonic anhydride)	C6H6O3	766-39-2	96	223					1.107 ¹⁰⁰
7	4-叔丁基酚 4-tert-butylphenol	C10H14O	98-54-4	99	240		1.4787 ¹¹⁴	1.66	0.908 ⁸⁰	
8	五氟苯甲酸 pentafluorobenzoic acid	C7HO2F5	602-94-8	102	220					
9	3-羟基苯甲醛 3-hydroxybenzaldehyde	C7H6O2	100-83-4	105	240				1.114 ¹³¹	1.1011 ^{150.4}
10	邻苯二酚 1,2-benzenediol(catechol,1,2-dihydroxybenzene)	C6H6O2	120-80-9	105	245			2.64	1.1493 ²²	1.137 ¹³¹

当前页码: 1/1, 10条纪录/页

图 3.2.27.2 物理性质实验值检索的结果

2)化合物检索计算性质 本数据库收集了有机所的化学信息学实验室计算得到的物质性质：基本物理性质，包括密度、沸点、闪点、电离常数、介电常数、折光率、极化率、蒸汽压、分子体积等；溶解性质，包括LogP, LogD, 固有溶解度等；拓扑性质，包括可给予的氢质子数、可接受的氢质子数、自由旋转键数、极性表面面积等。计算值存在一些误差，检索过程中忽略了误差。

化学数据库: [物理性质数据库->查找化合物的物性数据计算值](#) [根据计算数据查找化合物](#) [化合物物理性质\(实验值\)](#)

请输入化合物的信息

检索项目 检索内容

化合物中文名称

English Name

分子式

请选择计算性质

分子量 密度 沸点

闪点 折光率 蒸汽压

等张比容 极化率 表面张力

焓 摩尔折射 摩尔体积

溶解度 (PH=) 固有溶解度 疏水常数LogP

疏水常数LogD (PH=) 吸着系数KOC (PH=) 生物富集系数BCF (PH=)

表观离解常数 可给予的氢质子数 可接受的氢质子数

自由旋转键数 极性表面面积 不包括二价硫的极性表面面积

图 3.2.27.3 物理性质计算值检索首页

化学数据库: [化合物计算数据库->检索结果](#) [返回上一页](#) [重新检索](#)

根据检索条件共查询相应的 20条记录

序号	化合物名	Density	计算数据	分子式	结构图
1	(2S,3S,4S,5R,6S)-6-(6-bromo-3-(2-methoxyphenylcarbamoyl)naphthalen-2-yl)oxy-3,4,5-trihydroxy-tetrahydro-2H-pyran-2-carboxylic acid (2S,3S,4S,5R,6S)-6-(6-溴-3-(2-甲氧基苯氧基-羧基甲酰)-萘-2-氧基)-3,4,5-三羟基-四氢-2H-吡喃-2-羧酸	1.696	所有计算数据	C24H22BrNO9	
2	2-hydroxy-2-phenylbutyl carbamate 2-羟基-2-苯基丁基氨基甲酸酯	1.18	所有计算数据	C11H15NO3	
3	(2R,3R,4S,5S,6R)-2-(((2R,3S,4S,5R)-3,4-dihydroxy-2,5-bis(hydroxymethyl)tetrahydrofuran-2-yl)oxy)-6-(hydroxymethyl)tetrahydro-2H-pyran-3,4,5-triol N/A	1.775	所有计算数据	C12H22O11	
4	2,3,5,6-tetrachlorobenzoic acid 2,3,5,6-四氯苯甲酸	1.735	所有计算数据	C7H2Cl4O2	
5	1-(2-hydroxypropyl)-3,7-dimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione 1-(2-羟基丙基)-3,7-二甲基-1H-嘌呤-2,6(3H,7H)-二酮	1.462	所有计算数据	C10H14N4O3	
6	2-(diethylamino)ethyl 2,2-diphenylacetate hydrochloride 2-(二乙胺基)乙基 2,2-二苯基乙酸盐酸		所有计算数据	C20H25NO2.ClH	
7	(3E,6Z)-3,6-bis(methylimino)octane-1,8-diyl bis(3,4,5-trimethoxybenzoate) dihydrochloride (3E,6Z)-3,6-二(甲基亚氨基)辛烷-1,8-二基二(3,4,5-三甲氧基苯酸)二盐酸	0	所有计算数据	没找到分子式	
8	2,3,4,5-tetrachlorobenzoic acid 2,3,4,5-四氯苯甲酸	1.735	所有计算数据	C7H2Cl4O2	
9	2,3,4-trichlorobenzoic acid 2,3,4-三氯苯甲酸	1.636	所有计算数据	C7H3Cl3O2	
10	1-(5-amino-2-hydroxyphenyl)ethanone 1-(5-氨基-2-羟基苯基)乙酮	1.242	所有计算数据	C8H9NO2	

[下一页](#) [最后一页](#) 页码: 1/2

查看当前化合物其他计算数据

分子量	密度	沸点	闪点	折光率	蒸汽压
等张比容	极化率	表面张力	焓	摩尔折射	摩尔体积
溶解度	固有溶解度	疏水常数LogP	LogD	吸着系数KOC	生物富集系数BCF
总表观离解常数	可给予氢质子数	可接受氢质子数	自由旋转键数	极性表面面积	不包括二价硫的极性表面面积

图 3.2.27.4 物理性质计算检索结果

本页面的所有化合物，可以点击页面下方的链接查看其它物理性质(计算值)，比如上图中点击“摩尔体积”，

结果如图 3.2.27.5 所示. 点击“所有计算数据”, 则可查看化合物的全部物理性质(计算值), 如图 3.2.27.6.

序号	化合物名	Molar_Volume	计算数据	分子式	结构图
1	(2S,3S,4S,5R,6S)-6-(6-bromo-3-(2-methoxyphenylcarbamoyl)naphthalen-2-yloxy)-3,4,5-trihydroxy-tetrahydro-2H-pyran-2-carboxylic acid (2S,3S,4S,5R,6S)-6-(6-溴-3-(2-甲氧基苯氨基羰基<苯氨基甲酰>萘-2-氧基)-3,4,5-三羟基-四氢-2H-吡喃-2-羧酸	323.366	所有计算数据	C24H22BrNO9	
2	2-hydroxy-2-phenylbutyl carbamate 2-羟基-2-苯基丁基氨基甲酸酯	177.293	所有计算数据	C11H15NO3	
3	(2R,3R,4S,5S,6R)-2-((2R,3S,4S,5R)-3,4-dihydroxy-2,5-bis(hydroxymethyl)tetrahydrofuran-2-yloxy)-6-(hydroxymethyl)tetrahydro-2H-pyran-3,4,5-triol N/A	192.83	所有计算数据	C12H22O11	
4	2,3,5,6-tetrachlorobenzoic acid 2,3,5,6-四氯苯甲酸	149.766	所有计算数据	C7H2Cl4O2	
5	1-(2-hydroxypropyl)-3,7-dimethyl-1H-purine-2,6(3H,7H)-dione 1-(2-羟基丙基)-3,7-二甲基-1H-嘌呤-2,6(3H,7H)-二酮	162.947	所有计算数据	C10H14N4O3	
6	2-(diethylamino)ethyl 2,2-diphenylacetate hydrochloride 2-(二乙胺基)乙基 2,2-二苯基乙酸盐酸		所有计算数据	C20H25NO2.ClH	
7	(3E,6Z)-3,6-bis(methylimino)octane-1,8-diyl bis(3,4,5-trimethoxybenzoate) dihydrochloride (3E,6Z)-3,6-二(甲基亚氨基)辛烷-1,8-二基二(3,4,5-三甲氧基苯酸)二盐酸	0	所有计算数据	没找到分子式	
8	2,3,4,5-tetrachlorobenzoic acid 2,3,4,5-四氯苯甲酸	149.766	所有计算数据	C7H2Cl4O2	
9	2,3,4-trichlorobenzoic acid 2,3,4-三氯苯甲酸	137.815	所有计算数据	C7H3Cl3O2	
10	1-(5-amino-2-hydroxyphenyl)ethanone 1-(5-氨基-2-羟基苯基)乙酮	121.674	所有计算数据	C8H9NO2	

图 3.2.27.5 查看化合物的其他性质

当前位置:物理性质数据库->化合物物理数据 [返回上页](#) [我要纠错](#)

SR#号: 10	
英文名称: (2S,3S,4S,5R,6S)-6-(6-bromo-3-(2-methoxyphenylcarbamoyl)naphthalen-2-yloxy)-3,4,5-trihydroxy-tetrahydro-2H-pyran-2-carboxylic acid	
中文名称: (2S,3S,4S,5R,6S)-6-(6-溴-3-(2-甲氧基苯氨基羰基<苯氨基甲酰>萘-2-氧基)-3,4,5-三羟基-四氢-2H-吡喃-2-羧酸	
基本物性:	
(计算值)	
分子量	548.3368
密度(g/cm ³)	1.696
闪点	399.092
沸点(760mmHg)	736.286
介电常数	
折光指数	1.727
等张比容(90.2K)	978.378
极化率(10 ⁻²⁴ cm ³)	50.991
表面张力(dyne/cm)	83.8
焓(kJ/mol)	112.746
蒸汽压(25°C)	0
摩尔折射(cm ³)	128.625
摩尔体积(cm ³)	323.366
溶解性质:	
(计算值)	
固有溶解度	.003
溶解度(PH=7)	12.576
LogP	2.122
LogD(PH=7)	-2.333
吸着系数(PH=7)	1
生物富集系数(PH=7)	1
拓扑性质:	
(计算值)	
可给予的氢质子数	5
可接受的氢质子数	10
自由旋转键数	9
极性表面面积	154.78
不包括二价硫的极性表面面积	154.78

图 3.2.27.6 查看化合物的全部计算性质

3)根据计算数据查找化合物

如用户同时输入了两项或者两项以上的性质, 那么将会检索同时符合您的要求的化合物, 部分符合要求的化合物将不会被检索到:

例如您输入了折光率“ $1.2 \leq Y \leq 2.5$ ”和疏水常数 $\log P$ “ $0.5 \leq Y \leq 1.5$ ”，那么将会检索那些折光率在 1.2 到 2.5 之间，且 $\log P$ 在 0.5 到 1.5 之间的化合物，如图 3.2.27.7，检索结果如图 3.2.27.8。

化学数据库: [化合物计算数据库](#) -> [根据计算数据查找化合物](#) [查找化合物的计算数据](#)

设定目标物质的性质的范围: 请注意保持右边的数据大于左边的数据!

分子量:	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
密度(g/cm ⁻³):	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
沸点(°C, 760mmHg):	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
闪点(°C):	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
折光率:	1.2	<= Y <=	2.5
蒸汽压(25°C):	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
等张比容(90.2K):	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
极化率(10 ⁻²⁴ cm ³):	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
表面张力(dyne/cm):	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
焓(kJ/mol):	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
摩尔折射(cm ³):	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
摩尔体积(cm ³):	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
溶解度(PH= <input type="text" value="7"/>)	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
固有溶解度:	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
疏水常数LogP:	0.5	<= Y <=	1.5
疏水常数LogD(PH= <input type="text" value="7"/>)	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
吸着系数KOC(PH= <input type="text" value="7"/>)	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
生物富集系数BCF(PH= <input type="text" value="7"/>)	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
可给予的氢质子数:	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
可接受的氢质子数:	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
自由旋转键数:	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
极性表面积:	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>
不包括二价硫的极性表面积:	<input type="text"/>	<= Y <=	<input type="text"/>

图 3.2.27.7 输入计算数据

化学专业数据库: [化合物计算数据库](#) -> [检索结果](#) [返回上一页](#) [重新检索](#)

根据检索条件共查询相应的 11 条纪录

序号	化合物名	计算数据	分子式	结构图
1	4-acetamido-2-acetoxybenzoic acid 4-乙酰氨基-2-乙酰氧基苯甲酸	计算数据	C11H11NO5	
2	(dimethylamino)methyl dimethylcarbamodithioate 二(甲基氨基)甲基二甲氨基羧基二硫酯	计算数据	C6H14N2S2	
3	2-phenylcyclopropanamine 2-苯基环丙胺	计算数据	C9H11N	
4	(1-phenylpropan-2-yl)hydrazine (1-苯基丙烷-2-基)肼	计算数据	C9H14N2	
5	4-amino-2-ethoxybenzoic acid 4-氨基-2-乙氧基苯甲酸	计算数据	C9H11NO3	
6	5-(chloromethyl)-3-(5-nitrofuran-2-yl)-1,2,4-oxadiazole 5-(氯甲基)-3-(5-硝基呋喃-2-基)-1,2,4-噁二唑	计算数据	C7H4ClN3O4	
7	3-(o-tolyl)oxypropane-1,2-diol 3-(o-甲苯氧基)丙烷-1,2-二醇	计算数据	C10H14O3	
8	5-nitrofuran-2-carbonitrile 5-硝基呋喃-2-甲腈	计算数据	C5H2N2O3	
9	1-ethylindolin-2-one 1-乙基二氢吲哚-2-酮	计算数据	C10H11NO	
10	1-(5-nitrothiazol-2-yl)imidazolidin-2-one 1-(5-硝基噻唑-2-基)咪唑烷-2-酮	计算数据	C6H6N4O3S	

[下一页](#) [最后一页](#) 页码: 1/2

图 3.2.27.8 输入计算数据检索的结果