

## 介绍一个核磁共振波谱解析的学习网站

金晋慷, 盛伊甸, 吕萍\*, 陆展\*

浙江大学化学系, 杭州 310000

**摘要:** 核磁共振技术是化学工作者分析化合物结构与纯度的重要工具, 尤其在有机化学方向的科研工作中, 这项技术得到了广泛的应用。本文介绍了一个交互式的核磁共振波谱解析练习网站, 通过练习解析真实核磁共振波谱, 学生可以逐步建立对核磁共振波谱技术的认知, 逐渐学会如何解读学习、工作中遇到的核磁共振谱图。在本科阶段学习与练习核磁共振波谱解析技能, 将有助于学生未来科研工作的顺利进行。借助文中介绍的练习网站, 学生可以方便地选择难度合适的练习题进行学习提升。

**关键词:** 核磁共振; 波谱解析; 练习网站

**中图分类号:** G64; O6

## Introducing a Website for Learning Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectrum Analysis

Jinkang Jin, Yidian Sheng, Ping Lu\*, Zhan Lu\*

Department of Chemistry, Zhejiang University, Hangzhou 310000, China.

**Abstract:** Nuclear magnetic resonance (NMR) technology is an important tool for chemists to analyze compound structures and purity, especially in organic chemistry research, where it is widely applied. This article introduces an interactive NMR spectrum analysis practice website. By practicing the analysis of real NMR spectra, students can gradually develop an understanding of NMR spectroscopy techniques and learn how to interpret the spectra encountered in their studies and work. Learning and practicing NMR spectrum analysis skills during undergraduate studies will help students smoothly conduct future research work. With the practice website introduced in this article, students can easily choose practice questions of appropriate difficulty level to enhance their learning.

**Key Words:** Nuclear magnetic resonance; Spectrum analysis; Practice website

核磁共振(Nuclear magnetic resonance, NMR)是吸收光谱的一种形式, 类似于红外或紫外光谱。在适当的磁场条件下, 样品能够吸收射频(Radio frequency, RF)电磁辐射, 而所吸收的辐射频率取决于样品的特性。吸收与分子中某一特定原子有关, 以吸收峰频率对吸收峰强度作图构成NMR谱图<sup>[1]</sup>。使用核磁共振波谱技术, 我们可以在现代科学的许多有关化合物与材料结构的研究领域中获得有用的信息。在化学专业相关的科研工作中, 核磁共振波谱常被用作一种简单、直接且非破坏性的强大仪器工具, 用以推测有机化合物与材料的结构信息<sup>[2]</sup>。除此以外, 核磁共振波谱技术还可以提供有关化学反应动力学<sup>[3-5]</sup>、分子间相互作用<sup>[6-8]</sup>、或反应机制<sup>[9,10]</sup>的信息。

化合物的一维氢谱, 通常可以给我们提供许多有关纯度与简单化合物结构的信息。一维碳谱中

收稿: 2024-03-18; 录用: 2024-05-08; 网络发表: 2024-05-27

\*通讯作者, Emails: pinglu@zju.edu.cn (吕萍); luzhan@zju.edu.cn (陆展)

基金资助: 国家自然科学基金(22271249); 中央高校基础研究基金(226-2022-00224, 226-2024-00003)

的连接质子测试(Attached proton test, APT)以次甲基、亚甲基和甲基这些不同级数的 $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ 耦合为基础。在脉冲序列中,通过调整脉冲序列的时间间隔,季碳和亚甲基相位朝上(正信号),次甲基和甲基相位朝下(负信号)。因为相位是可以调节的,所以这个规律亦可以相反。这是一种利用不同类型的碳原子各自耦合常数的不同来区分碳原子级数,现在衍生为常用的DEPT法(distortion enhancement by polarization transfer)<sup>[1]</sup>。二维核磁共振谱图则能提供更多分子内自旋核相互作用的信息,通过二维谱图中的交叉峰信号,我们可以推断出多个原子之间键连模式,对于鉴别复杂分子的结构十分重要。常用的二维核磁共振实验包括同核相关与异核相关实验,如 $^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$ -COSY (Correlation spectroscopy, 关联性磁振频谱)、 $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ -HSQC (Heteronuclear singular quantum correlation, 异核单量子关系)和 $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ -HMBC (Heteronuclear multiple bond correlation, 异核多碳相关谱)。一维、二维核磁共振以及质谱等谱学技术的应用大大提高了我们阐释有机小分子化学结构的能力。

在解析核磁共振谱图时,我们需要综合运用理论知识、实践经验以及脑海中一闪而过的灵感,来将核磁共振波谱仪输出的谱图转化为易于读懂的分子结构式。我们往往需要同时关注谱图上信号峰的数量、形状、积分强度、化学位移、裂分模式以及信号间的耦合值,才能准确地解析一张NMR图谱。这意味着,学生需要不断地进行学习与锻炼,才能熟练地掌握波谱解析这一项实用的技能<sup>[11,12]</sup>。同时,来源于实验室条件的真实谱图往往会存在较为复杂的光谱效应、杂质信号峰与噪声干扰,使得解析波谱的难度进一步增大。与模拟谱图相比,真实谱图更加复杂、更具有迷惑性与挑战性,也更加贴近科研工作实际。使用真实谱图作为练习题相比模拟谱图练习,更能使学生深刻理解波谱技术原理、高效提升科研工作中所需要的波谱解析能力。因此,我们认为,在化学专业本科学生学习核磁共振波谱时配合使用真实谱图作为练习题,可以更有效地培养学生波谱解析能力,为其未来的科研工作提供更多的帮助。

## 1 练习网站介绍

尽管真实谱图练习尤为关键,但为本科教学准备一套真实的核磁共振谱图练习题却是相当费时费力的。我们通常需要通过数据库查询某种样品的谱图数据,并考察其核磁共振波谱解析难度与结果的唯一性。如果自行制作化合物谱图,则更为繁琐。如果想更加贴合学生的学习情况,帮助其更快更精准地提升解谱水平,对不同的练习题进行难度分级也是必要的,但这也意味着需要付出更多的时间与精力。综合来看,从头制作、分类并审核一套练习是一项耗时耗力的工作,难以在短时间内发展成熟。如果可以使用网络工具,将一定数量的练习题累积、汇总,或许会让这个过程变得简单而高效。

在这里,我们将介绍由捷克科学院有机化学与生物化学研究所Martin Dračínský小组开发的在线平台NMR-Challenge.com网站<sup>[13]</sup>(<https://nmr-challenge.uochb.cas.cz/#Basic>)。该网站提供了近200道与有机化合物核磁共振波谱相关的挑战,涵盖一维氢谱、碳谱、二维NMR谱和部分其他类型的波谱。根据题目所涉及的核磁共振波谱类型以及练习的难度,网站将全部核磁共振题目进行了编号与分类(图1)。较为基础的Basic题库只涉及一维 $^1\text{H}$ 、 $^{13}\text{C}$  NMR以及少数杂原子谱图的问题,题目简单,易于上手,非常适合初次学习核磁共振的学生练习。更为进阶的Advanced题库涉及一维和二维NMR问题,难度较高,更加适合解谱水平较高的同学强化练习。同时,两个题库内均根据题目的难度再次分为简单(Easy)、中等(Moderate)与困难(Hard)三部分,便于使用者根据自己的水平选择更为合适的练习题。各种难度的题库内还提供随机练习模式,此模式下网站会在所选的题库范围内随机抽取题目以供学生练习,增加了练习的趣味性。

网站中所收纳的题目均来自对真实样品的测量,杂质信号、溶剂信号、重叠信号与磁场的非均匀性均可能在所提供的谱图中体现。题目将会提供化合物的分子式、经过处理(相位与基线校正、化学位移参考值设定、积分、注释、展开和选峰等处理)的核磁共振波谱图(图2A)以便学生读取信息。学生需要利用所提供的信息推断并给出合理的分子结构。

Basic Simple 1D problems		Advanced 1D and 2D problems	
All difficulties Start random exercise »		All difficulties Start random exercise »	
Easy (0/72) Start random exercise »		Easy (0/13) Start random exercise »	
1 2 3 5 8 9 11 12 13 14 18 19 24 25 32 34 35 38 40		10 11 13 14 17 18 19 20 22 24 37 45 46	
41 42 44 48 49 52 56 59 60 62 63 64 66 67 68 69 71 72 73		Moderate (0/13) Start random exercise »	
74 76 77 78 81 82 86 88 89 90 93 96 98 99 104 105 112 113 115		6 12 15 27 29 31 32 34 36 38 47 49 50	
118 122 124 128 129 130 131 136 137 143 144 145 146 147 148		Hard (0/25) Start random exercise »	
Moderate (0/51) Start random exercise »		1 2 3 4 5 7 8 9 16 21 23 25 26 28 30 33 35 40 41	
4 7 10 15 16 17 20 21 23 26 27 28 29 30 31 33 36 37 39		42 44 48 51 52 53	
46 47 58 61 65 70 75 80 83 84 87 92 95 101 110 111 116 119 120			
121 123 125 127 132 133 134 135 138 139 140 141 142			
Hard (0/25) Start random exercise »			
6 22 43 45 50 51 53 54 55 57 79 85 91 94 97 100 102 103 106			
107 108 109 114 117 126			

图1 练习网站题库列表

**A Task 52 (Easy)** Next task »

**Spectra**

$C_9H_{10}O_2$

$^1H$  NMR (600 MHz,  $CDCl_3$ )

$^{13}C$  APT (151 MHz,  $CDCl_3$ )

**B Draw your solution**

Formula:  $C_9H_{10}O_2$

Submit solution ✔ Correct Try next one »

**C Draw your solution**

Formula:  $C_9H_{10}O_2$

Submit solution ✘ Wrong

**D Draw your solution**

Formula:  $C_9H_{10}O_2$

Submit solution ✘ Wrong, check formula

图2 题目呈现方式与程序对不同答案的反馈

- (A) 练习题所提供的 $^1H$  NMR与 $^{13}C$  APT谱图示意; (B) 结构正确时网站给出“Correct”反馈;  
 (C) 结构错误时网站给出“Wrong”反馈; (D) 结构分子式有误时网站给出“Wrong, check formula”反馈

在完成对题目的解析后, 我们可以将答案绘制在网页底部的提交窗口进行提交。网站所采用的绘图应用程序使用方法直观, 类似于常用的绘图软件ChemDraw。我们可以通过侧边栏选择不同的原子与成键方式, 可以便捷地绘出答案结构式。程序会根据原子价自动添加氢原子, 进一步简化了绘图操作。完成绘图后, 点击“Submit solution”按钮提交答案, 程序会自动检查结构式并给出相应的

反馈。绿色“Correct”反馈表示分子式与结构正确(图2B)，同时该题将会在题库目录中以绿色角标标记。如果提交结构分子式符合但结构不正确，程序将反馈红色的“Wrong”(图2C)。如果提交结构的分子式不符合，程序将会提示“Wrong, check formula”(图2D)。在部分题目中，考虑到同一张谱图可能存在多种合适的解读结果，答案并不唯一，存在多个合理的答案。如Advanced-Hard-Task41，输入三个互为互变异构体的答案均可以得到绿色“Correct”反馈。

目前，网站练习题库仍在不断地更新扩充中。如果对题目有任何的疑惑，如推测的合理答案并不在参考答案范围之内，学生也可以通过网站最下方的电子邮件地址方便地与网站管理者联系，网站管理者将会认真回复并解答学生的疑惑。

## 2 练习使用案例

该核磁共振练习网站整体布局简洁，谱图均采用无背景的.png文件格式上传，在各种大小的显示器上均能清晰显示。网站所采用的交互式绘图工具同时适合于手机、平板触摸屏与电脑显示屏，使得学生可以非常便捷地在多种设备上访问网站与练习。同时，网站支持切换夜间模式，在较暗的背景下仍具有很高的使用舒适度。

学生可以根据自己的学习进度选择合适的练习难度：初学者推荐选择Basic题库中的Easy与Moderate练习题组，更加熟练的学者可以选择Basic题库中的Hard题组，正在学习二维谱图解析的学者可以选择Advanced题库。单击所选的题目序号进入相应的题目，也可以选择随机练习模式随机选择题库中的题目进行练习。

下面将以三道习题作为例，简要介绍网站的使用方法，考虑到部分初学者尚未建立解析核磁谱图的基本逻辑，其中第一道例题将做详细分析(图3-图5)。

### 2.1 Basic-Easy-Task 1例题分析

根据所提供的分子式为 $C_4H_8O_2$ ，计算得到分子的不饱和度为 $\omega = 1$ ，表明分子可能拥有不饱和键、单环等结构。观察一维 $^1H$ NMR谱图，可以辨识出四个主要的信号峰。根据理论所学与文献知识<sup>[14]</sup>，可以辨别化学位移 $\delta = 7.27$ 处的信号峰应该为氘代溶剂 $CDCl_3$ 的氢谱信号，故在接下来的分析中不再考虑此信号。

进一步观察，化学位移 $\delta = 4.15$ 附近有一组积分值为2的信号峰，可推测其为与杂原子氧直接相连的亚甲基氢原子。该信号峰裂分重数为4，可以计算得与这个亚甲基相连的碳上应该有3个氢，即为一个甲基。同时，我们发现化学位移 $\delta = 1.28$ 附近有一组三重裂分的信号峰，积分值为3，与上述推测的甲基氢化学环境相符，分子中可能含有一个乙氧基的结构。最后一个化学位移值 $\delta = 2.07$ 的积分值为3的单峰，提示我们存在一个连接电负性基团的甲基。在分子式中减去一个乙氧基与甲基的分子式，剩下一个碳，一个氧，可以组成一个羰基。此时，化学位移 $\delta = 2.07$ 的甲基找到了归属，即分子中存在甲基酮的结构。至此，我们已经推断出分子中含有两个结构片段：一个乙氧基与一个甲基酮。将这二者组合，我们可以推测题示分子应该是乙酸乙酯。

通过碳谱数据检验所推测的结构： $\delta = 171.2$ 处的信号峰应该来自 $sp^2$ 杂化的酯基碳原子，由于吸电子的氧原子起到了去屏蔽的作用，酯基碳的 $\delta$ 值通常在150以上。同样受到吸电子氧的去屏蔽作用，分子中与氧相连的亚甲基信号处于 $\delta = 60.4$ 处，大于通常的烷基碳。 $\delta = 21.1$ 与 $\delta = 14.2$ 两个信号分别来自于两个甲基，与酯基相连的甲基由于酯基微弱的去屏蔽作用而拥有较大的 $\delta$ 值。根据书本中的知识判断， $\delta = 77.1$ 附近的信号峰应当为氘代溶剂 $CDCl_3$ 的碳谱信号。综上，每一个碳谱信号峰均能在所推测的乙酸乙酯分子结构与氘代溶剂 $CDCl_3$ 中找到归属，证实了答案的合理性(图3B、C)。

将所推测的乙酸乙酯分子的结构式在答题框中绘出，得到正确的反馈。点击“Try next one”按钮，进入下一题。也可以及时根据题目难度重新选择合适的题库。如果所推测的结构不正确，则继续分析波谱寻找有用的信息，逐渐更正答案直至结构正确(图3D)。

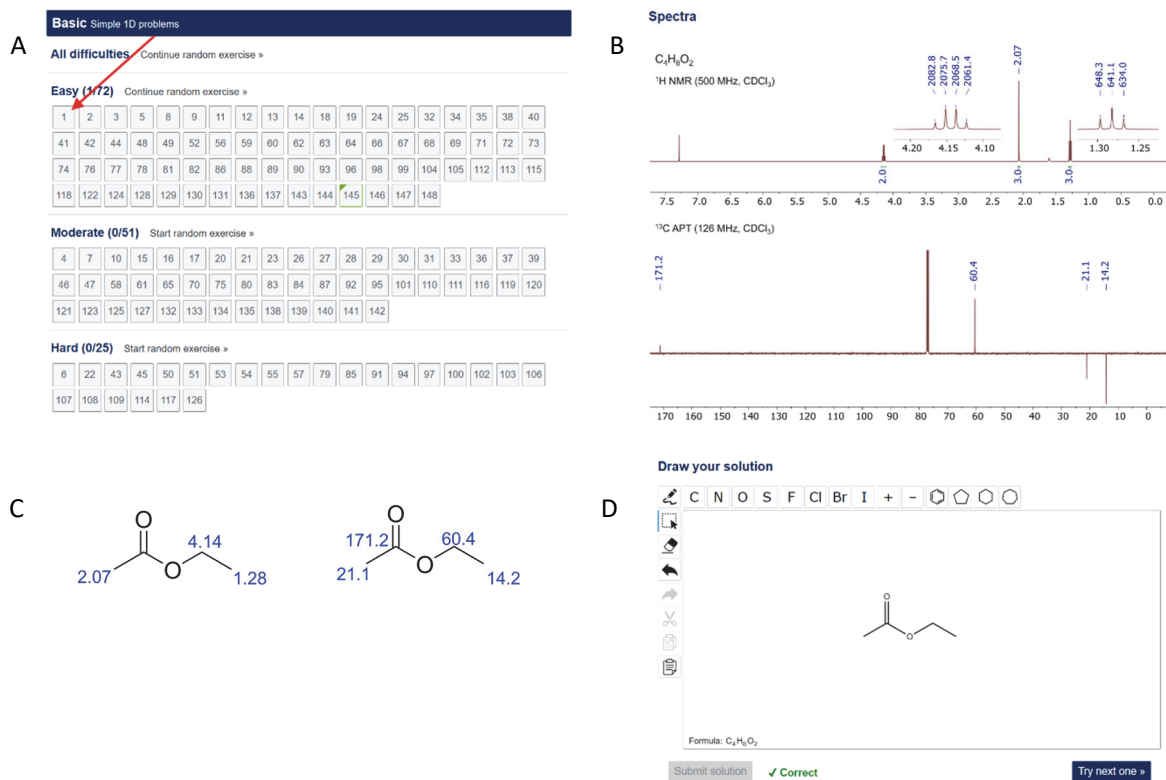


图3 网站练习方法流程(Task 1)

(A) 在题库列表中选择Basic-Easy-Task 1例题；(B) Task 1所提供的 $^1H$  NMR与 $^{13}C$  APT谱图；(C)  $^1H$  NMR与 $^{13}C$  APT谱图信号峰归属示意；(D) 检验程序验证结构正确

## 2.2 Basic-Easy-Task 145例题分析

根据所提供的分子式 $C_8H_8O_2$ ，计算得分子的不饱和度为 $\omega = 5$ 。较高的不饱和度提示分子中可能具有芳环的结构，结合分子在化学位移 $\delta = 6.5\text{--}8.0$ 区间内有两组积分值为2.2的芳香环氢原子信号峰，推测分子中应该存在对位二取代的苯环结构。

进一步观察谱图，分子在化学位移值 $\delta = 10.34$ 处存在一个“\*”符号标记的可交换的质子，应该为具有酸性的活泼氢，由此推测分子应具有苯酚或者羧酸等具有酸性氢的结构。分子在化学位移值 $\delta = 2.47$ 处存在一个积分值为3的单峰，应该为一个连接吸电子基团的甲基的信号峰。同时化学式中有两个氧原子，推测该分子应该具有甲基酮与苯酚或者甲基苯与羧酸的结构。综合上述分析可知，波谱所示的分子结构可能为1-(4-羟基苯基)乙-1-酮或4-甲基苯甲酸。此时，单纯凭借一维 $^1H$  NMR谱图，我们得到了不止一个可能合理的结构，我们需要进一步结合碳谱分析。

结合碳谱数据易得答案为1-(4-羟基苯基)乙-1-酮：首先， $\delta = 196.1$ 处的碳应该为 $sp^2$ 杂化的醛、酮羰基碳原子，羧基化学位移一般在 $\delta = 165\text{--}185$ 的范围内；其次，1-(4-羟基苯基)乙-1-酮分子的结构中，苯环上直接与羟基相连的碳，由于受到氧的吸电子去屏蔽效应，应该具有更高的化学位移值，与碳谱中 $\delta = 162.0$ 的信号峰相符合。然而，在4-甲基苯甲酸分子内苯环上的碳原子并不会受到强烈的屏蔽/去屏蔽效应， $\delta$ 值应该在区间 $100\text{--}150$ 范围内，与所提供的碳谱不符。由此分析可知，所推断的分子结构符合碳谱的数据，而另一分子不符合(图4B、C)。

将所推测并经过检验的结构式在答题框中绘出，得到正确的反馈(图4D)。

## 2.3 Advanced-Moderate-Task 29例题分析

Advanced题库涉及二维谱图，尽管二维谱图可以提供很多信息，但其主要地位仍是辅助性的，建议初学者更多地从一维谱图出发进行分析。

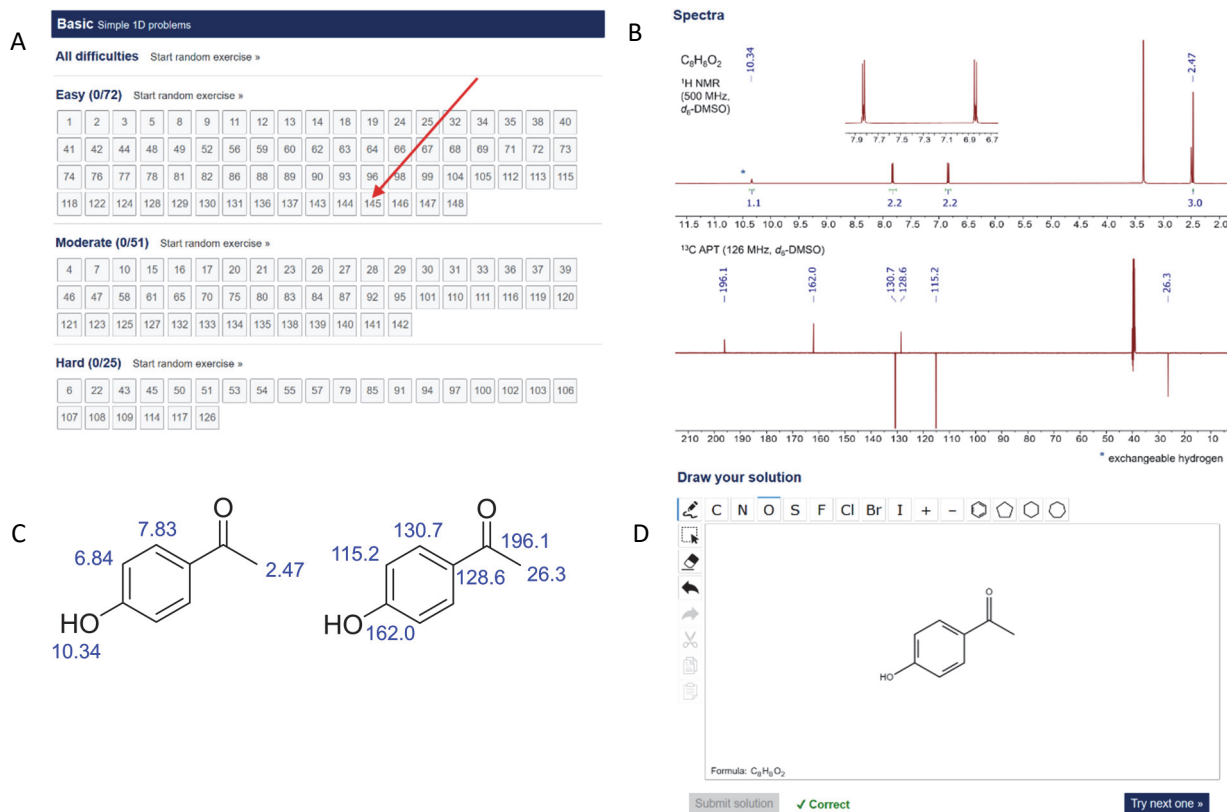


图4 网站练习方法流程(Task 145)

(A) 在题库列表中选择Basic-Easy-Task 145例题；(B) Task 145所提供的 $^1H$  NMR与 $^{13}C$  APT谱图；

(C)  $^1H$  NMR与 $^{13}C$  APT谱图信号峰归属示意；(D) 检验程序验证结构正确

根据所提供的分子式 $C_8H_{10}N_2O_2$ ，计算得分子的不饱和度为 $\omega = 3$ 。结合分子式碳谱中 $\delta = 177.0$ 和 $\delta = 155.9$ 两个信号，初步猜测分子中存在两个羰基，故剩下一个不饱和度可能来自环状结构。

由于没有多余的氧原子，谱图中标注的活泼氢应来自伯胺或仲胺。此外根据化学位移可知，这两个羰基应与氮原子相连。

接下来，结合HSQC将氢谱信号和碳谱信号进行组合。点击左上角“HSQC”窗口，可以观看HSQC谱图。显然， $\delta = 7.9$ 的碳与 $\delta = 0.93$ 左右的氢组成一个甲基， $\delta = 23.6$ 的碳与 $\delta = 1.45$ 的氢组成另一个甲基， $\delta = 64.2$ 的碳在HSQC谱中没有给出，暗示此处无信号，可以确定为一个季碳， $\delta = 1.7$ 和 $\delta = 1.9$ 的两组积分面积约为1的氢，结合碳谱峰朝向和HSQC信号，可以确定为 $\delta = 30.9$ 的碳上的两个氢，对应一个连接在手性中心上的亚甲基。

接下来，结合HMBC拼接上述基团。点击左上角“HMBC”窗口，可以观看HMBC谱图。首先，亚甲基连接最高场的甲基，这一点可以从氢谱给出的耦合常数得到证明，并从HMBC上的碳氢耦合信号中得到佐证。另一个甲基没有裂分，并和亚甲基与季碳中心均有HMBC信号。由此我们可以初步推断出这样一个结构：一个连有甲基和乙基的手性季碳中心。

此时，我们发现，我们只剩下了两个碳原子，恰好对应我们最初猜想的两连有氮原子的羰基。此时，我们可以很自然地想到一个双氮杂五元环结构，稍加考虑手性，就可以得到正确答案：5-甲基-5-乙基乙内酰胺。

将所推测并经过检验的结构式在答题框中绘出，得到正确的反馈(图5D)。

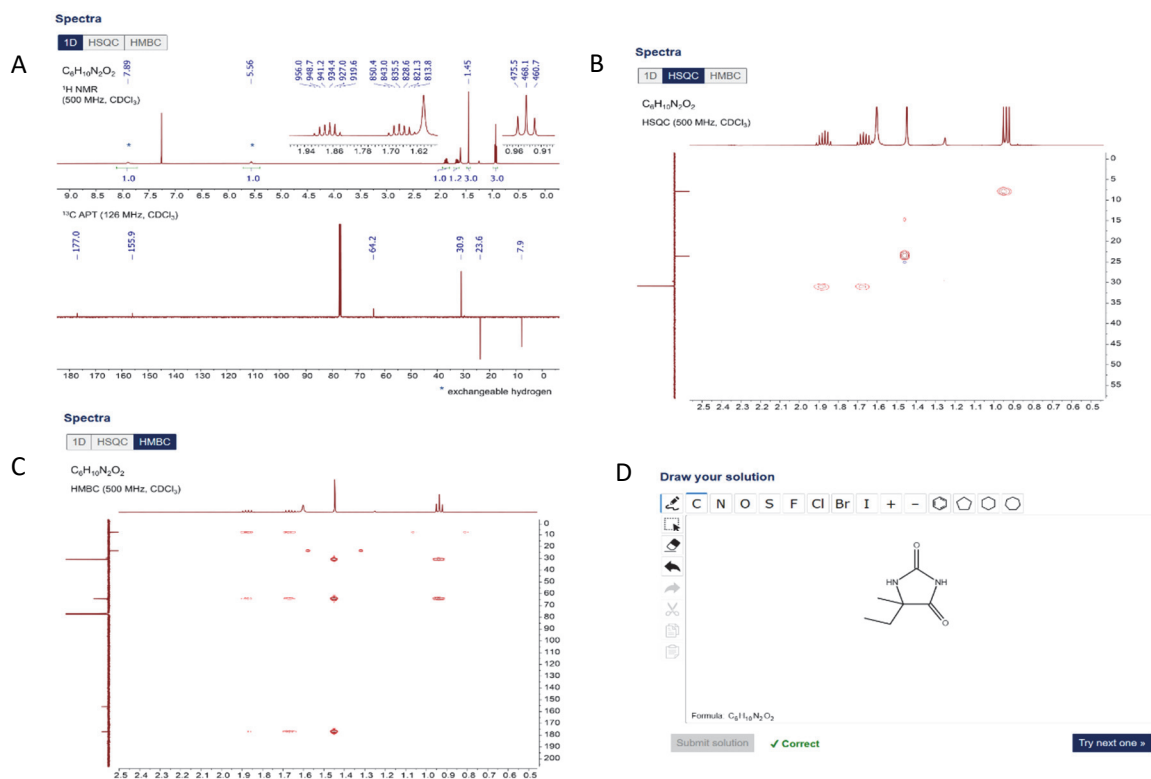


图5 网站练习方法流程(Task 29)

(A) Task 29所提供的 $^1\text{H}$  NMR与 $^{13}\text{C}$  APT谱图; (B) Task 29所提供的HSQC谱图;

(C) Task 29所提供的HMBC谱图; (D) 检验程序验证结构正确

值得注意的是，核磁谱图的解析并不总是建立在严格的逻辑推理上，经验、直觉、猜想、调整等都是思考的重要环节。对于此类交互式网站，恰当的试错也不失为一种学习方法。

自主完成这样的一些难度合适的波谱练习题，学生可以巩固通过阅读与记忆获取的有关化学位移、信号峰裂分、积分的知识。通过判读真实谱图，有助于学生逐步建立对光谱效应与杂质、溶剂干扰的初步概念，帮助其加深对核磁共振原理的理解。

## 2.4 练习辅助工具

在进行核磁共振波谱解析练习时，我们可能会受困于知识储备不足、灵感不足等问题，或是难以判断多种可能结构的合理性、难以将谱图中的信号峰归属到结构式中。我们有时需要借助一些辅助性的工具或网站，帮助我们更好地解析问题，理解原理。

在常用的有机绘图软件ChemDraw中，有一项十分实用的功能： $^1\text{H}$  NMR与 $^{13}\text{C}$  NMR谱图预测功能。以ChemDraw22为例，我们只需要在软件中绘制结构式，选中结构后选择“Structure”栏目中的“Predict  $^1\text{H}$ -NMR Shifts”或“Predict  $^{13}\text{C}$ -NMR Shifts”，便能分别得到程序预测的一维氢谱图与一维碳谱图<sup>[15,16]</sup>。

以Task 1中的乙酸乙酯分子为例，我们使用ChemDraw预测其一维氢谱(图6A)。软件将会输出包含信号峰归属、预测 $^1\text{H}$  NMR谱图以及详细的信号数据的页面文件(图6B)。将预测谱图与Task 1提供的真实谱图(图6C)对比，发现ChemDraw的预测功能很好地考虑了化学位移与信号峰的裂分情况。所预测的 $^1\text{H}$  NMR谱图基本符合实验事实，该程序对于简单的有机分子往往能以很高的可信度给出相应的谱图预测。借助这些程序预测的谱图，我们可以更快地排除真实谱图中的干扰信号，直击问题关键之处，更加轻松地解释各信号峰的归属。对于初学者而言，学会解释信号峰化学位移与峰形的

由来往往需要很长时间的思考与知识积累。但借力ChemDraw程序预测,初学者可以在练习的过程中更快地掌握谱峰归属这项关键的技能,有助于其后续的学习归纳。但也需要注意,对于复杂的分子结构,预测程序往往无法全面地考察所有的相互关系,给出的预测谱图可能与真实情况有所偏差。在使用预测程序辅助练习时,要注意甄别其合理性。

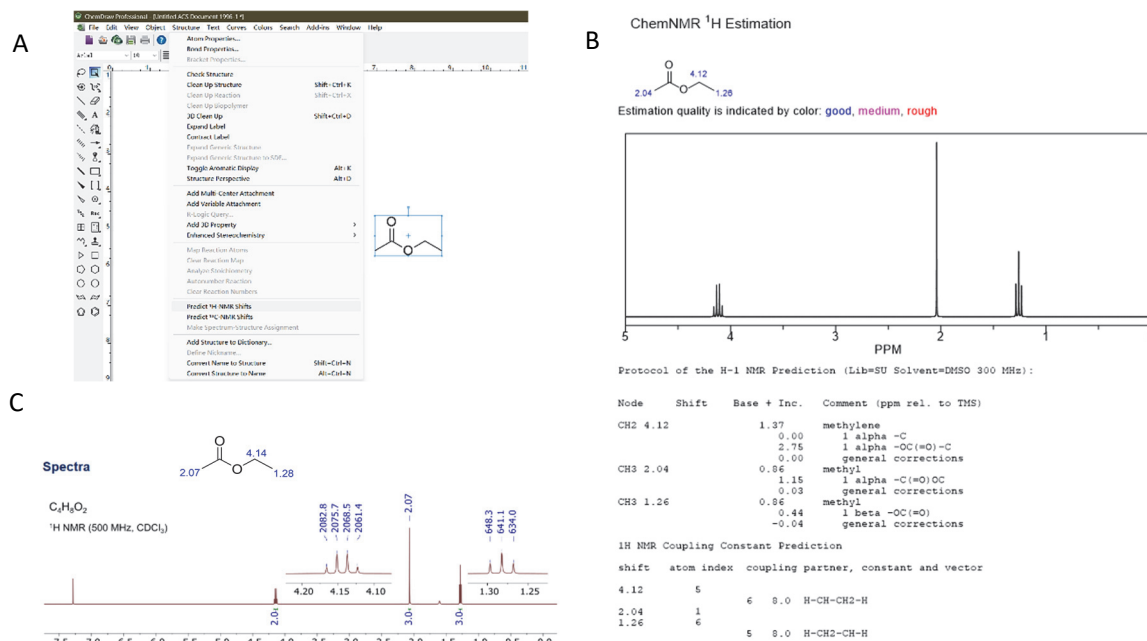


图6 ChemDraw预测与真实谱图比较

(A) 使用ChemDraw软件中“Predict  $^1\text{H-NMR}$  Shifts”功能示意; (B) ChemDraw软件给出的 $^1\text{H}$  NMR预测报告;

(C) Task 1中 $^1\text{H}$  NMR谱图信号峰归属示意

其他的辅助网站如“爱化学”网站(<http://www.ichemistry.cn/>)提供分子式检索功能。在做题思维固化,难以跳出某一特定结构限制的时候,学生可以借助分子式检索工具,查看对应分子式所包含的多种同分异构体。学生在根据谱图信息寻找自己所需要的同分异构体时,往往可以获得新的灵感与思路。此外,“ChemicalBook”网站(<https://www.chemicalbook.com/>)可以进行子结构搜索。在推断出某一片段结构而对分子整体结构仍百思不得其解时,可以在该网站输入片段结构,搜索各种包含指定片段的分子。即使未必能找到答案中的分子,此方法也可以有效地拓宽思维。

除此以外,我们也可以通过检索数据库来获取分子的真实核磁共振谱图。我们可以通过“Spectral Database for Organic Compounds”这个数据库检索网站(SDBS, [https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi](https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi))来便捷地查找分子的真实谱图。该网站提供化合物名称搜索、分子式搜索、CAS编号搜索等精确搜索方式,也提供如分子量范围检索、原子个数范围检索等模糊检索方式。网站同时收录了 $^1\text{H}$  NMR、 $^{13}\text{C}$  NMR、IR、Raman等谱图数据,供所需者查询浏览。

我们依然以Task 1中的乙酸乙酯分子为例,通过“ChemicalBook”网站查询可得其CAS号为:141-78-6。将CAS号输入对应文本框内后点击“Search”按钮(图7A),网站将会跳转至搜索结果列表,表内含有满足搜索条件的所有收录的分子。单击所需要的分子编号,网页跳转进入详细信息页面。页面的左边栏给出了分子的基本信息与数据库内所收录的不同谱图,我们可以选择得到自己所需要的谱图(图7B)。值得一提的是,该网站在收录时已经将核磁共振波谱数据与分子结构做了归属,我们在谱图下方的列表中可以很方便地得知各信号峰与原子的对应关系。

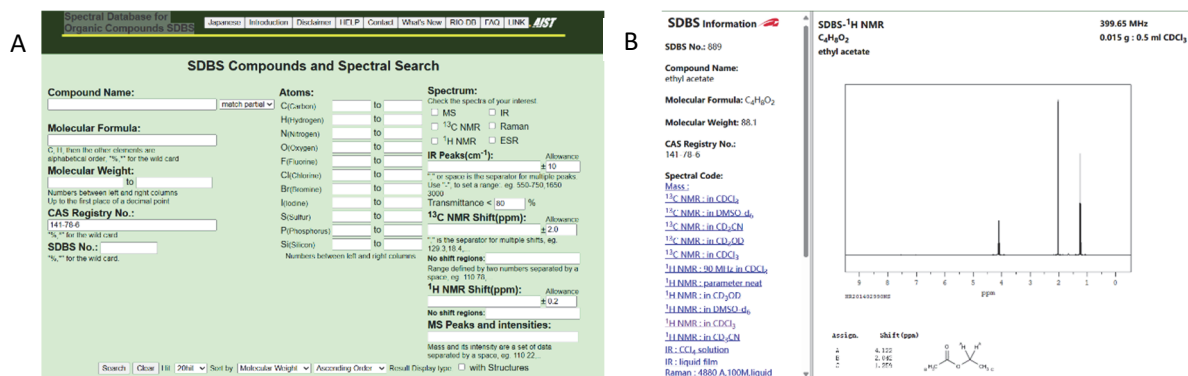


图7 使用“SDBS”网站查询分子真实谱图

(A) “SDBS”网站查询化合物谱图信息步骤示意; (B) 网站化合物信息详情页面与所收录的 $^1\text{H}$  NMR谱图信息

在独立完成练习题后, 学生可以与老师或是同学交流自己对题目的看法与理解, 分享自己的做题思路。学习伙伴之间的交流能帮助学生快速拓宽做题眼界, 建立更为灵活的解题思路, 真正理解归纳吸收所做过的题目、所学过的知识, 为未来的学习工作提供更有效的帮助。

### 3 结语

核磁共振波谱解析是化学科研工作者的一项重要技能, 借助核磁共振技术, 我们可以推测物质的结构与纯度。在本科阶段学习核磁共振波谱解析, 对学生初次接触科研与研究生阶段的科学研究均能提供很大的帮助。在此, 我们推荐了一个核磁共振练习网站。网站包含不同难度分组的练习题, 通过清晰的谱图显示与可交互化的结构绘图检验程序, 允许核磁共振学习者使用多种设备访问学习。我们希望通过练习解析真实核磁共振谱图, 帮助学生逐渐建立对核磁共振原理的认知, 帮助其更有效地解决未来工作中可能遇到的问题。

### 参 考 文 献

- [1] Robert, M. S.; Francis, X. W.; David, J. K. 有机化合物的波谱解析. 药明康德新药开发有限公司分析部, 译. 上海: 华东理工大学出版社, 2007: 125.
- [2] 宁永成. 有机化合物结构鉴定与有机波谱学. 第4版. 北京: 科学出版社, 2018: 1.
- [3] Kibrik, E. J.; Steinhof, O.; Scherr, G.; Thiel, W. R.; Hasse, H. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2014**, *53*, 12602.
- [4] Jaroszewicz, M. J.; Liu, M. X.; Kim, J.; Zhang, G. N.; Kim, Y.; Hilty, C.; Frydman, L. *Nat. Commun.* **2022**, *13*, 833.
- [5] Susanne, F.; Smith, D. S.; Codina, A. *Org. Process Res. Dev.* **2012**, *16*, 61.
- [6] Dracinsky, M. *Annu. Rep. NMR Spectrosc.* **2017**, *90*, 1.
- [7] Lehmann, J.; Kleinpeter, E.; Krechl, J. *J. Inclusion Phenom. Mol. Recognit. Chem.* **1991**, *10*, 233.
- [8] Xu, Y. J.; Kumar, V.; Bradshaw, M. J. Z.; Bryce, D. L. *Cryst. Growth Des.* **2020**, *20*, 7910.
- [9] Chae, Y.; Min, S.; Park, E.; Lim, C.; Cheon, C. H.; Jeong, K.; Kwak, K.; Cho, M. *Anal. Chem.* **2021**, *93*, 2106.
- [10] Janková, S.; Dracinsky, M.; Cisarová, I.; Kotora, M. *Eur. J. Org. Chem.* **2008**, *2008*, 47.
- [11] 丁飞, 张翠, 邱晓航, 大学化学, **2021**, *36* (7), 2012050.
- [12] 王多志, 刘晨江, 大学化学, **2016**, *31* (6), 29.
- [13] Socha, O.; Osifová, Z.; Dračinský, M. *J. Chem. Educ.* **2023**, *100*, 962.
- [14] Gottlieb, H. E.; Kotlyar, V.; Nudelman, A. *J. Org. Chem.* **1997**, *62*, 7512.
- [15] 浦蕊, 杨艳华, 高树林, 李艳妮, 广州化工, **2021**, *49* (23), 129.
- [16] 王仁中, 许凤清, 周武喜, 张伟, 王国凯, 王举涛, 吴德玲, 刘劲松. 广州化工, **2023**, *51* (1), 287.