

## 旧谱新声(生)——基于旧仪器改造的创新实验教学

吴晶<sup>1</sup>, 王威<sup>1</sup>, 兰景凤<sup>2</sup>, 俞娥<sup>2</sup>, 蒲巧生<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>兰州大学化学化工学院, 兰州 730000

<sup>2</sup>化学国家级实验教学示范中心(兰州大学), 兰州 730000

**摘要:** 当前仪器分析实验中所使用的商品化设备结构较封闭、自动化程度高, 使用方便但不利于教学过程中功能单元和运行过程的展示, 针对该问题我们对一台旧的核磁共振波谱仪进行了数字化改造。利用数据采集卡代替其原装的笔式信号记录仪及示波器, 并编写专用程序, 实现了对仪器模拟信号的数字化处理及计算机上谱图的显示、处理和存储。经改造, 仪器功能更贴合教学需求, 多维度地提升了仪器分析实验的教学效果, 不仅有助于深化学生对理论的理解, 还可激发学生的创新意识。

**关键词:** 核磁共振波谱仪; A/D转换; 数据采集; 虚拟仪器

**中图分类号:** G64; O6

## New Life of an Old Spectrometer: An Innovative Experiment Based on the Digitization of an Obsolete Instrument

Jing Wu<sup>1</sup>, Wei Wang<sup>1</sup>, Jingfeng Lan<sup>2</sup>, E Yu<sup>2</sup>, Qiaosheng Pu<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> College of Chemistry and Chemical Engineering, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China.

<sup>2</sup> National Demonstration Center for Experimental Chemistry Education (Lanzhou University), Lanzhou 730000, China.

**Abstract:** Today, commercial analytical instruments used in teaching are often enclosed and highly automated, which, while convenient for routine analysis, can hinder the demonstration of instrument components and operations during the teaching process. To address this issue, we modified an old nuclear magnetic resonance (NMR) spectrometer to enable digital signal output. By replacing its mechanical recorder and cathode-ray tube oscilloscope with a data acquisition card and custom software, we successfully facilitated the display, manipulation, and storage of spectra on a computer. This modification enhances the instrument's suitability for teaching, allowing for more direct observation and hands-on operation, thereby improving students' understanding and stimulating their innovative thinking. It significantly enhances the educational outcomes of instrumental analysis experiments.

**Key Words:** Nuclear magnetic resonance (NMR) spectrometer; A/D conversion; Data acquisition; Virtual instruments

使用台式或笔记本电脑来控制分析仪器几乎已经成为现代分析仪器的标配, 因此将模拟信号转换为数字信号是仪器分析实验教学中的重要内容之一。几乎所有的分析仪器内部都包含数据采集及仪器控制单元, 但由于这些单元通常集成在仪器内部, 在教学中学生难以直接观察到, 因此无法对仪器原理产生直观的认识。事实上, 目前能够用于展示分析仪器数据采集功能的设备极为稀少, 因此开发具备这种功能的教学设备显得非常必要。

收稿: 2024-08-30; 录用: 2024-09-20; 网络发表: 2024-12-09

\*通讯作者, Email: puqs@lzu.edu.cn

基金资助: 甘肃省教育厅2023年高等教育教学成果培育项目(PX-48232713); 兰州大学教育教学改革研究项目(202212); 教育部化学“101计划”——化学测量学实验课程建设项目; 教育部第三批虚拟教研室建设试点——“101计划”化学测量学实验课程虚拟教研室

另一方面, 当前市售的分析仪器多为分析检测工作设计, 具有高集成度和高度自动化的特点。这些仪器为了确保使用效果, 通常在结构上较为封闭, 反而不利于教学, 因为学生难以清晰地理解仪器的内部结构和工作状态。有学者调研了多个版本的化学实验教材, 指出现有教材普遍缺乏对分析仪器深层次结构的详细讲解, 几乎未涉及仪器附件功能的拓展、维护与维修知识, 以及仪器的组装与研发等内容<sup>[1]</sup>, 这一现象也揭示了当前实验教学改革的一个重要方向。国内外有不同学科的学者开展了教学仪器的研发和改造的相关工作, 比如, 谢天尧等<sup>[2]</sup>研制了“毛细管电泳富集仪”、王晓岗等<sup>[3]</sup>设计改造了“多功能凝固点测定仪”等多种仪器于实验教学, 均取得了良好的教学效果; Eric J. Davis等<sup>[4]</sup>利用3D打印技术制作了一系列可安装在光学平台上并用于构建化学仪器的光学支架和工具, 提供给高年级仪器分析课程中使用, 学生们利用这些光学设备设计搭建了一台可见光分光光度计并进行了测试。Marianna Fanouria Mitsioni等<sup>[5]</sup>也搭建了一台低成本的“do-it-yourself”型分光光度计, 用于光谱学部分的问题导向情境(problem-based scenario)式教学, 帮助学生提高化学素养。Neethu Emmanuel等<sup>[6]</sup>搭建了低成本的便携式拉曼光谱仪用于本科生实验, 其灵活的设计策略使得不同激发波长的拉曼系统可根据需要进行配置, 学生通过分步搭建仪器的过程, 掌握了开发个性化定制仪器的技能。

早期的仪器通常集成度较低, 自动化程度不高, 各功能单元往往可以直接观察到。虽然这些仪器已经难以满足现代分析测试的需求, 但它们在教学中具有展示仪器结构和解释工作原理的独特优势。在实际教学中, 采购于20世纪八九十年代的仪器则具有这样的特点, 但是原机型又无法满足现代分析仪器的计算机控制和自动化教学需求。然而, 如果对这些老旧仪器的易损件和信号输出进行数字化改造, 它们则可能成为理想的教学专用分析设备。这种改造不仅有助于激发学生的兴趣, 还能显著提升教学效果。

核磁共振波谱仪(NMR)作为一种精密的科学分析工具, 在化学、生物学、医药学等学科的教学和科研中发挥着不可替代的作用<sup>[7,8]</sup>。其结构包括磁体、射频发射器、接收器、计算机和数据处理系统, 利用强磁场使得原子核自旋状态发生变化, 通过射频脉冲激发产生的核磁共振信号可以反映样品分子的结构信息。

基于此, 我们对一台旧的核磁共振波谱仪进行了数字化改造升级, 实现了对仪器模拟信号的数字化处理及计算机控制功能的完善。这项改造不仅让学生能够深入掌握核磁共振波谱仪的基础操作与数据处理流程, 还帮助他们理解仪器的维护、功能拓展, 甚至是新型仪器设计与制造的基本概念, 从而促进了学生创新能力和综合素质的提升。

## 1 教学需求

在针对本科生开展的核磁共振波谱法实验中, 学生需要全面掌握NMR理论的基本原理、仪器的结构与操作流程, 以及谱图的解析方法。用于教学的NMR仪器必须具备足够开放的硬件和软件设计, 以便学生能够直观地观察和操作, 真正做到“看得见、摸得着”, 从而取得良好的教学效果。然而, 当前市售的分析仪器主要面向商业用途, 其设计重点在于高自动化程度和操作的简便性, 导致硬件和软件系统相对封闭, 难以支持深入的学习与实践。

因此, 市场上难以直接采购到能够满足教学需求的专用分析仪器。教学中所需的仪器不仅需要具备基本的NMR功能, 还应能够展示仪器的内部结构和信号处理过程, 使学生能够从基础层面理解NMR技术的工作原理和应用。为此, 开发或改造现有仪器以适应教学需求, 已成为当前仪器分析实验教学中的重要任务。

## 2 核磁共振波谱仪改造方案

### 2.1 原仪器的功能、优点和局限性分析

实验室有一台采购于20世纪80年代连续波核磁共振波谱仪(JNM-PMX60Si, 日本电子JEOL株式会社)。基本结构包括控制面板(含机械信号强度表、机械按钮和旋钮)、阴极射线管(Cathode ray tube,

CRT)示波器、核磁主机(含永久磁体)以及笔式信号记录仪,如图1所示(图片中未包含CRT示波器与笔式信号记录仪)。

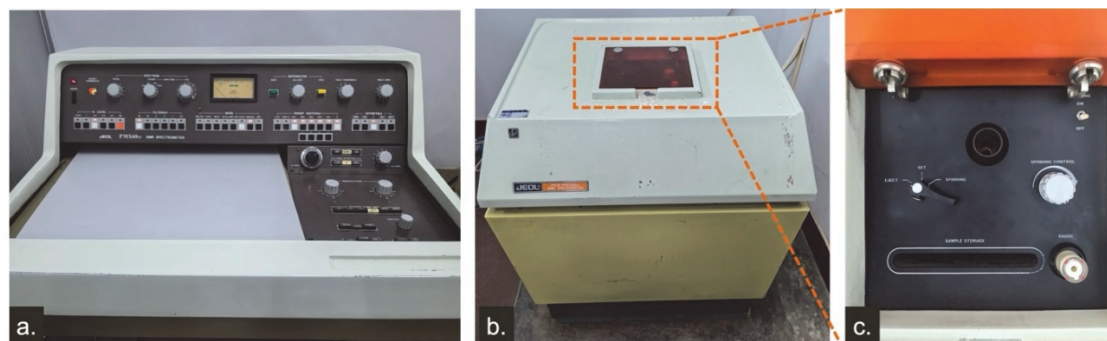


图1 JNM-PMX60Si核磁共振波谱仪实物照片

(a) 仪器的机械控制面板; (b) 核磁主机; (c) 样品放置口

仪器参数调试和样品测试全部为手动模式,在调试过程中需通过控制面板上的机械按钮和旋钮进行操作。核磁主机输出的模拟信号传输至示波器屏幕上显示,用以判断磁场均匀度是否已调节至最佳状态。样品所产生的核磁共振信号也由主机传输至笔式记录仪,谱图被其绘制在专用的核磁共振坐标纸上。数据处理时需要通过使用控制面板上的INTEG按钮在坐标纸上绘制积分曲线,谱图记录方式完全过时,已不适应现代数字化的教学和科研需求。

## 2.2 改造策略以及实施过程

为了更好地满足教学需求,我们对该核磁共振波谱仪进行了改造,改造内容包括:通过恰当的手段获取数字信号,摆脱传统示波器和纸版记录仪的束缚,以虚拟仪器的形式实现谱图的数字化处理和保存。从模拟信号到数字信号的转换(Analog to Digital, A/D转换)可以通过数据采集卡(Data Acquisition Card)来实现。获得谱图的数字信号后,能够以标准化格式存储和共享,并可以使用现代化的软件工具进行处理和分析。

### 2.2.1 仪器的数字化改造

本工作选择了高精度16位的数据采集卡USB-6210(National Instrument)用于A/D转换,其采样速率高达 $250\text{ kS}\cdot\text{s}^{-1}$ ,能够以极低的失真度采集模拟信号;同时它具有16路模拟输入(Analog input, AI),4路数字输入(Digital input, DI),以及4路数字输出(Digital output, DO)<sup>[9]</sup>。

核磁共振波谱仪原本输出三组模拟信号:第一组是测样时主机输出的核磁共振谱图信号,即原仪器输出至笔式记录仪的强度信号(谱图纵坐标);第二组是记录笔位置的信号(对应扫描频率,谱图的横坐标);第三组信号对应快速扫场下的谱图,原仪器输出到示波器,以便在手动调节磁场温度补偿旋钮时观察尾波变化,确保磁场均匀性。在改造过程中,三组信号分别被连接至数据采集卡的三个AI端口。

为了更好地用于教学,我们利用LabVIEW(National Instruments)专门编写了信号调试与数字谱图信号的采集和处理软件,对应的虚拟仪器界面如图2所示。与传统的硬件仪器相比,虚拟仪器具有更高的灵活性和可扩展性,能够根据教学和研究的需要,轻松调整和升级仪器的功能。通过在LabVIEW中设计虚拟仪器界面,用户可以在计算机上完成信号调试、数据采集、处理和分析的全过程,这不仅节省了硬件资源,还能更直观地展示仪器原理和数据处理过程,极大地提升了教学的互动性和效果。

为了便于讲解和使用,软件为分立模块式结构,由5个功能模块组成,各个模块均可独立使用,对应的功能如表1所示。设置合适的采样参数后进行实验,便可在电脑软件上观测到相应的谱图,获得的数字信号后续可以用核磁谱图处理软件进行处理。

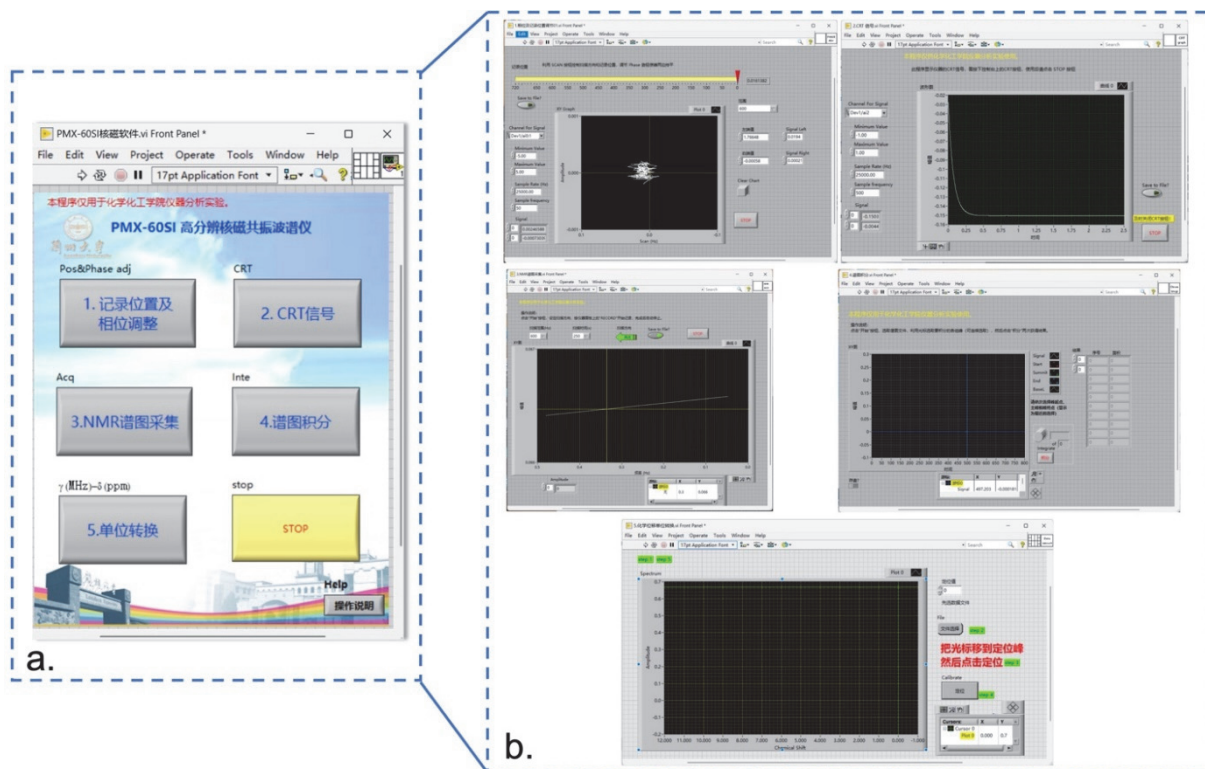


图2 自行编写的核磁软件界面

(a) 主界面: (b) 各个功能模块工作界面

表1 核磁共振波谱仪模块化软件的功能说明

模块序号	模块名称	模块功能
1	记录位置及相位调整	模拟记录笔的位置, 显示扫描位置对应的频率, 可以通过观察软件界面确认扫描的起点, 也可根据需要在某一范围内往复扫描以便于观察调整相位时的谱图
2	CRT信号	代替阴极射线示波器, 用于调节磁场均匀度时信号的尾波观察
3	NMR谱图采集	在恰当的采样参数下进行核磁共振信号的采集
4	谱图积分	计算峰面积
5	单位转换	采集的原始数据横坐标为共振频率, 将其转换为化学位移, 并根据内标的化学位移调零

### 2.2.2 改造后仪器的操作流程

整体而言, 仪器的运行依旧依赖于控制面板上的机械按钮和旋钮来实现调节。在引入数据采集卡进行改造后, 计算机主要承担了信号的显示、记录以及处理的功能。因此, 基本的操作流程并未发生改变, 如图3所示, 每一个步骤打开对应的程序模块运行即可。

在实验教学时, 通过每一步的手动操作, 可以让学生深入理解仪器的设计思路和结构。以下三个具体步骤为例, 来说明仪器原理和对应的教学价值。

第2步: 找信号。该步的关键知识点是温度对磁场强度的影响及其重要性。永久磁铁的磁场强度对温度变化较为敏感, 温度波动可能导致磁场强度的微小变化, 从而影响核磁共振信号的位置和稳定性。这种不稳定性不仅会影响NMR信号的频率精度, 还可能降低谱图的分辨率。通过调整温度补偿旋钮, 可以减小或消除温度变化对磁场强度的影响, 使内标物的峰准确显示在CRT信号模块的中间位置。通过这一操作, 学生能够理解温度补偿在保持磁场稳定性和提高谱图分辨率中的重要作用, 并学习如何通过精确调节温度补偿来优化实验条件, 确保实验数据的准确性和可重复性。



图3 核磁仪和自编软件的配套使用流程

第3步：调节分辨率。该步的关键知识点是匀场。永久磁铁的磁场可能存在不均匀性，导致不同位置的磁场强度略有差异。通过调节不同方向的补偿线圈上的电流，可以修正这些不均匀性，确保样品区域内的磁场更加均匀。这种均匀性在解析精细的化学位移和耦合常数时，对于提高谱图的分辨率和准确性至关重要。

在操作时，学生需要观察吸收信号衰减尾波的峰高和数量，这些尾波反映了核磁共振信号在外部射频场停止作用后的弛豫过程，是磁场均匀性的指示器。通过调节补偿线圈电流，直至吸收信号尾波的峰高达到主峰高度的85%，且尾波数量越多越好。当达到这一标准时，意味着分辨率已调好，对应的信号如图4所示。通过这一操作，学生可以直接观察到磁场均匀程度对谱图分辨率的影响。磁场越均匀，谱图的分辨率越高，这一过程帮助学生理解匀场在NMR实验中的关键作用。

第5步：样品测试。这一步的关键知识点是如何采集到核磁共振信号。由于仪器是信号输出方，软件是数据采集方，为了获得完整的数据，需要在按下控制面板上开始扫描的按钮的同时，运行NMR谱图采集的模块。同时，在这一步如果设置了过高或过低的采样频率，用户会收到软件报错或者失真的谱图数据。该操作可以使得学生体会信号输出和数据采集过程同步的重要性，并且会了解如何正确设置采样频率，理解采样频率对数据质量的影响。

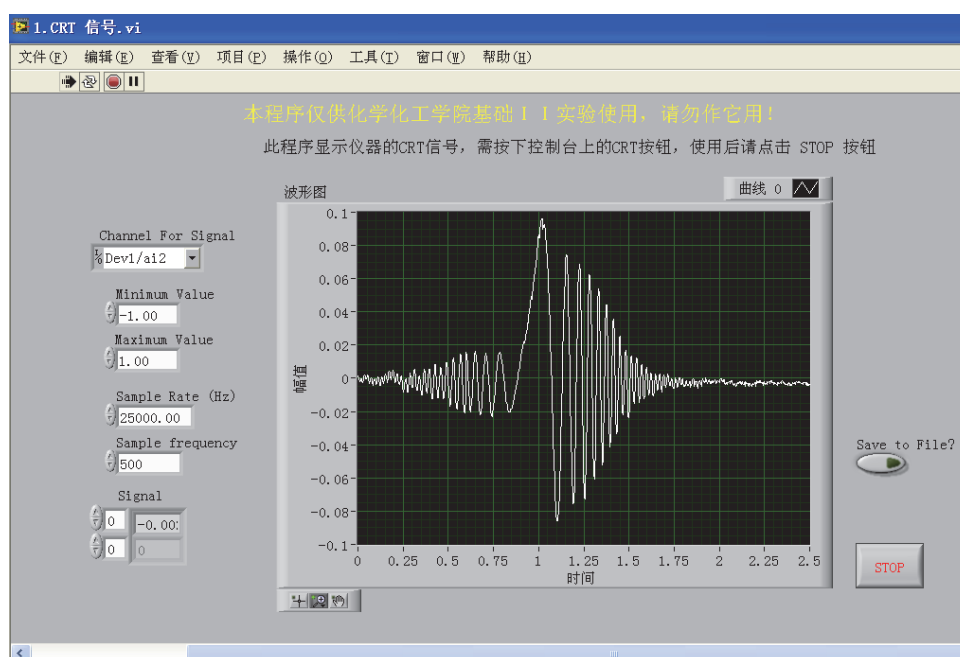


图4 手动匀场至最佳状态时，软件上CRT模块显示的尾波信号

### 3 改造后的样品测试结果

将仪器改造后，测试了肉桂醇样品的氢谱，利用常用的核磁软件如Mestrenova将其进行化学位移的标记和峰面积的积分，如图5a所示，说明在设置的采样参数下，波谱仪可以正常工作，原配的示波器和笔式记录仪完全可以被数据采集卡和相应的软件所代替。相较原始的纸版谱图(图5b)，使用更为方便。

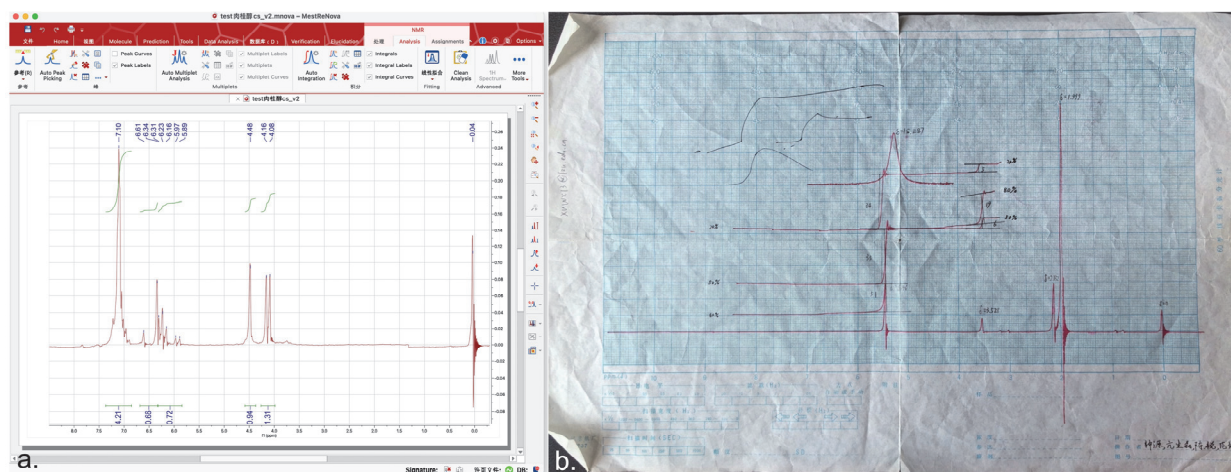


图5 改造前后波谱仪输出的核磁谱图

(a) 改造后获得的数字信号谱图；(b) 仪器原配的笔式记录仪所绘制的氢谱图

### 4 改造仪器用于实验教学的优势与创新之处

将旧仪器改造引入核磁共振波谱法的教学内容，在实验教学方面的优势与创新体现在以下三点。

(1) 新旧仪器的全方位比较，深化学生对专业知识的理解。

现代的核磁共振波谱仪为脉冲傅里叶变换型(FT-NMR)，且有自动匀场功能，内置数据采集卡并配备了数据采集软件，使用很便利。然而从学生学习的角度来看，这种便利性可能会导致他们忽略核磁信号在硬件层面的获得过程。

通过改造旧仪器，学生通过自己的实践手动调节温度补偿旋钮→看到核磁共振信号→进行谱图采集这一过程，可以更直观地了解匀场的原理和作用。改造后的教学内容还引入了新的知识点，即数据采集技术和LabVIEW软件的应用。不仅使学生深刻理解了模拟/数字转换(A/D)和数据采集的基本原理，相比于直接使用提供数字信号的商业化分析仪器，这种方法还更能激发学生的思考和学习兴趣。除此之外，通过比较新旧仪器得到的谱图的信噪比，可以加深对NMR不同扫描方式的理解。新旧仪器的比较举例如表2所示。

表2 两种不同原理的NMR在教学时可以进行比较的地方

扫描方式	改造后的CW-NMR	FT-NMR
匀场方式	手动调节匀场旋钮	自动完成
数据获得	利用数据采集卡和自编程序	自动完成，仪器内部集成了数据采集卡
扫描方式	施加的射频频率依次变化，完成一次常规扫描约需5 min，才能获得谱图，并且信噪比相对较小	设置适当的脉冲宽度、扫描次数、重复时间等参数，通过多次扫描的信号叠加能够获得高信噪比的谱图

在实验讲授过程中，从仪器发展的角度来学习不同仪器的功能和结构，可以帮助学生加深对技术原理的理解。通过比较不同仪器的优缺点，学生能够更全面地掌握各种技术的特点，提升动手能力和实践经验。此外，这种教学方法还使学生了解到核磁共振技术的发展历程和分析仪器的现代化改进方向，从而加深对技术演进的认识。

### (2) 培养创新实践能力。

通过技术改造的实际操作，学生有机会亲身参与旧仪器的升级过程，涵盖硬件改造和软件开发等多个方面。实验教学中，学生被分组参与不同的改造任务，要求他们记录和解决过程中遇到的问题。随后通过案例讨论，学生分析改造前后的差异，探讨技术革新对仪器性能和实验结果的影响。以实践为导向，不仅让学生接触到前沿技术，还激发了他们的创新思维和解决问题的能力。在不断调整和改进的过程中，学生的动手能力得到了锻炼，他们对技术创新和仪器改造的理解也更为深入，进一步提升了综合素质和实践技能。

### (3) 优化教学资源与推动学科融合。

通过对旧仪器的改造，不仅延长了现有设备的使用寿命，还为实验教学提供了更多样化的实践机会。学生在改造过程中，不仅学习了多种仪器的工作原理，还获得了跨学科的知识和技能，如电子学、编程和数据分析。同时，旧仪器的改造避免了资源浪费，实现了教学资源的最大化利用。这种学科间的融合和资源的优化利用，不仅增强了教学的深度和广度，也为学生提供了更全面和综合的学习体验。

此外，在实验课程的讲授过程中，还可以传递积极向上的价值观和人生观。我们应鼓励学生在面对困难和挑战时，勇于尝试新方法，培养他们的创新精神。同时，强调在使用设备时，减少对原装配件和耗材的依赖，努力在技术上实现自主可控。这不仅培养了他们的技术能力，也帮助他们树立科学的态度和严谨的工作作风，使他们在未来的学习和工作中更加自信和独立。

## 5 教学成效

自2014年秋季学期起，改造后的设备在本科生仪器分析实验课的核磁共振波谱法中开始使用。授课对象包括“拔尖计划”的化学精英班(2人小组)，以及化学、应用化学、化工、材料化学、放射化学、核化工等专业(8人小组)，教学场景如图6所示。经过10年的稳定运行，学生们对本课程给予了高度评价，主要反馈意见有：1) 改造后的仪器将教材中“匀场”的概念具体化，学生更清楚地体会到匀场是通过调节附加在永久磁体不同方位的匀场线圈电流来实现的。手动调节匀场旋钮时，学生能够在软件界面上实时观察核磁共振信号的变化，这一过程生动展示了磁场均匀性对核磁共振信号

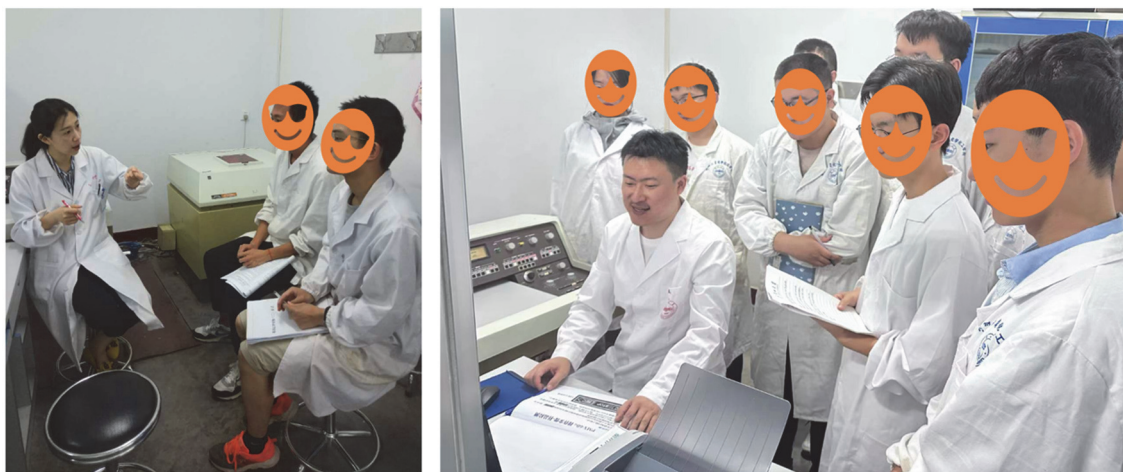


图6 使用改造后的核磁共振波谱仪的授课现场

质量的直接影响。2) 学生认为对现代科学仪器中数字信号的获取方式理解更为深刻, 明确了模拟信号与数字信号的区别, 掌握了数据采集的基本原理, 并认识到合理设置采样频率对实验结果的重要性。3) 在一学期的仪器分析实验过程中, 学生偶尔会遇到仪器故障。在了解了核磁共振波谱仪的改造过程后, 学生反馈在面对其他类型的仪器故障时, 能保持积极态度, 并基于仪器原理分析故障原因, 提出解决策略。

总体而言, 这种教学方式不仅拓宽了学生的知识视野, 也为他们未来在科研或工程领域的发展奠定了坚实的基础。

## 6 结语

为了更清晰地讲解NMR仪器的工作原理, 并强化学生对磁体温度补偿、匀场、核磁共振信号及数据采集等知识的理解, 我们对旧的连续波核磁共振波谱仪进行了数字化改造, 使其能够生成便于计算机存储和分析的数字化核磁谱图信号。这一改造使教学设备具备了开放性硬件和软件设计, 有助于学生深入理解数据采集和虚拟仪器的概念, 构建解决科研或工业领域技术挑战所需的知识体系和技能集。另外, 考虑到脉冲傅里叶变换在现代仪器中能够提供更好的信噪比和分辨率, 我们已采购了这类型的仪器, 并将在本学期引入教学中, 通过对比两种NMR数据获取方式, 进一步加深学生对核磁共振波谱原理的理解。从课程思政的角度来看, 这种实践教育更能激发学生探索未知、技术自立和勇于创新的精神。

## 参 考 文 献

- [1] 李伟红, 雷杰. 大学化学, **2023**, *38* (6), 82.
- [2] 谢天尧, 易佳, 张蔓书, 王筱, 罗学军. 大学化学, **2018**, *33* (3), 55.
- [3] 王晓岗, 郑凤, 许新华, 郝志显, 樊雅娟. 实验室科学, **2021**, *24* (2), 181.
- [4] Davis, E. J.; Jones, M.; Thiel, D. A.; Pauls, S. *J. Chem. Educ.* **2018**, *95*, 672.
- [5] Mitsioni, M. F.; Stouras, M.; Makedonas, C. *J. Chem. Educ.* **2023**, *100*, 2704.
- [6] Emmanuel, N.; Nair, R. B.; Abraham, B.; Yoosaf, K. *J. Chem. Educ.* **2021**, *98*, 2109.
- [7] 王玉枝, 宦双燕, 张正奇. 分析化学. 第4版. 北京: 科学出版社, 2023: 261-269.
- [8] Welch, B. G.; Cantillo, D. *J. Chem. Educ.* **2024**, *101*, 3459.
- [9] USB-6210. [2024-08-29]. <https://www.ni.com/zh-cn/shop/model/usb-6210.html>