

Chemoffice 2005 软件在波谱分析教学中的应用

陈佩东^① 姜伟

(南京中医药大学药学院 南京市汉中路 282 号 210029)

摘要 在波谱学教学过程中应用 Chemoffice 2005 画图软件中的模拟 NMR 图谱和立体模型功能, 讲解各种化学结构与核磁共振图谱的关系, 使学生在大量实践的基础上更快地具有解析核磁图谱的能力。

关键词 Chemoffice 2005, 波谱分析, 教学改革。

中图分类号: O657.2 **文献标识码:** B **文章编号:** 1004-8138(2006)03-0569-02

1 前言

在日常的波谱学教学中, 往往遇到学生对某些化学结构的核磁特征不易理解的情况, 有时是因为对化学物质的立体结构不熟悉, 有时是因为对¹H-NMR 和¹³C-NMR 波谱数据不熟悉, 还有的是因为对化学结构与核磁图谱的影响因素不清楚。教师在这种情况下急需一种直观、快捷的方式来帮助学生理解和掌握。但是, 不论是板书、挂图或是投影都不是理想的解决方式。随着计算机画图软件的发展, 教师不仅可以事先准备大量图谱, 而且还可以当堂演示一些 NMR 谱图, 有利于教学。本文介绍 Chemoffice 2005 画图软件在教学中的应用。

2 立体模型的模拟

在教学过程中常常会遇到由于立体构型的差别,¹H-NMR 和¹³C-NMR 谱中的化学位移值发生变化的情况。在平面结构中学生不太理解, 但是在立体模型前就很容易理解这种效应了。由于 Chemoffice 2005 不仅有绘图功能^[1], 还有非常强大的立体结构转换功能, 教师不仅可以在备课时准备模型, 而且在教学过程中也可以快速的临时转换模拟图, 提高教学效率和效果。

比如 1,4-二甲基环己烷中, 两个甲基的构型不同, 甲基质子和甲基碳的化学位移是不同的, 对于平面结构, 不容易看出区别, 但是看到立体模型后就会一目了然(如图 1)。



图 1 1,4-二甲基环己烷不同构型的平面结构和立体模型

3 核磁共振图谱的模拟

波谱解析的能力是在通过大量的实践过程中培养的。学生在课余时间可以到图书馆看 Standard Spectre, 通过大量的图谱来了解不同的氢核和碳核的核磁特征。随着多媒体技术的普及,

^① 联系人, 电话: (025) 51998168; E-mail: cpd@njutcm.edu.cn

作者简介: 陈佩东 (1970—), 男, 武汉市人, 讲师, 博士在读, 主要从事波谱分析和中药化学教学工作。

收稿日期: 2006-01-12; 接受日期: 2006-02-14

现在教师可以在课堂上直接演示各种化学物质的氢谱和碳谱。但是,教师的图谱储备是有限的,不可能什么类型物质的图谱都有,这时 Chemoffice 2005 就非常有用。我们可以通过它的图谱模拟功能,给学生演示大量图谱,以直观的方式增强学生的理解能力。比如下面苯乙酮的氢谱和碳谱的计算机模拟图(图 2),与实测值非常接近,对学生掌握基本的化学位移很有帮助。

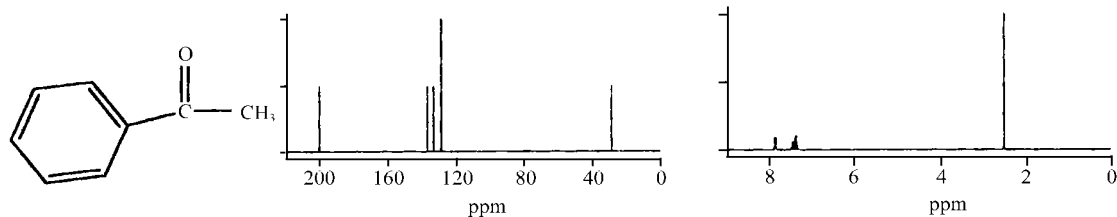


图 2 苯乙酮及其 $^1\text{H-NMR}$ 和 $^{13}\text{C-NMR}$ 模拟图

即使对于结构更加复杂的结构,Chem office 2005 也能给出与实测值近似的图谱,如图 3 中计算机模拟的莪术烯醇(Curcumenol)的碳谱和 Bruker ACF-300 型核磁共振仪测得的图谱非常接近,这给同类或近似结构的化学物质的图谱解析带来了方便。

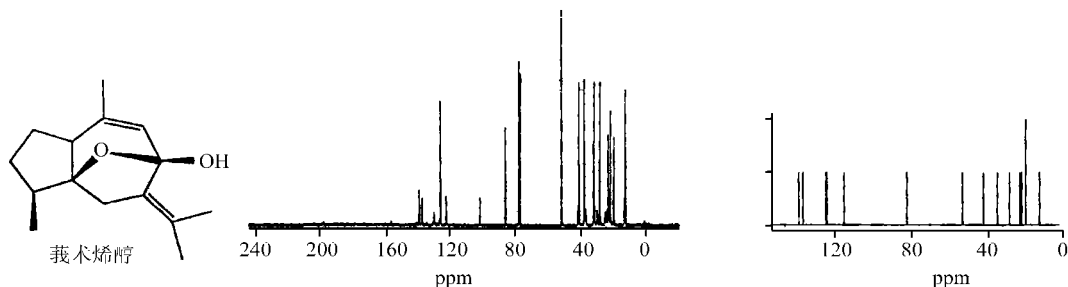


图 3 莪术烯醇的 $^{13}\text{C-NMR}$ (75Mz)实测图和计算机模拟图

在教学中,Chemoffice 2005 的作用是非常大的,但是它也有一些不尽人意的方面。如对于氢谱的模拟,虽然化学位移值比较精确,但是谱峰的峰型不易观察,而且对于活泼质子的位移值不能模拟。教师只有充分的了解 Chemoffice 2005 的优点和不足,才能在教学中运用自如,进行教学改革,获得较好的教学效果。

致 谢 本文中核磁共振图谱由中国药科大学分析测试中心测定。

参考文献

[1] 肖信,袁中直. Internet 上的有机化学软件[J]. 有机化学, 2000, 20(2): 263—268.

Application of Chemoffice 2005 in Teaching Spectroscopy Analysis

CHEN Pei-Dong DING An-Wei

(Nanjing University of Traditional Chinese Medicine, No. 282 Hanzhonglu, Nanjing 210029, P. R. China)

Abstract In the teaching of spectroscopy analysis, the simulation of NMR spectra and stereoscopic model of Chemoffice 2005 was utilized to clarify the relationship between molecular structure and nuclear spectroscopy, in order to train the students' ability to analyze spectra in practice.

Key words Chemoffice-2005, Spectra Analysis, Teaching Reform. All rights reserved. <http://www.c>