

# ChemDraw 在核磁共振光谱解析中的应用

★ 张锐 (江西省药物研究所 南昌 330029)

关键词: ChemDraw 8.0; 波谱解析; 化学位移; 模拟谱图

中图分类号: O 657 文献标识码: A

Chem Draw 由美国剑桥软件公司开发, 是 CS ChemOffice 2004 (8.0) 模块之一。其他几个模块还包括 Chem3D、ChemFinder、ChemOffice WebServer。其中 Chemdraw 主要用来绘制有机分子结构式、反应方程式; Chem3D 可以显示有机分子的三维立体图象; ChemFinder 是化学信息搜寻整合系统, 可以建立化学数据库、储存及搜索, 或搭配 ChemDraw、Chem3D 使用, 也可以使用现成的化学数据库, 还可以建立自己的数据库; ChemOffice WebServer 为化学网站服务器数据库管理系统。若将 ChemDraw、Chem3D 发表在网站上, 使用者就可用 ChemDraw Pro Plugin 网页浏览工具, 用 www 方式观看 ChemDraw 的图形, 或用 Chem3D Std 插件中的网页浏览工具观看 Chem3D 的图形。该软件可以运行于 Microsoft Windows 各版本下, 也可以运行在多种操作系统中。ChemDraw 为当前最常用的结构式编辑软件, 除了以上所述的一般功能外, 其 ultra 版本还可以预测分子的常见物理化学性质如: 熔点、生成热等; 对结构按 IUPAC 原则命名; 预测质子及碳 13 化学位移等。

本文将就其在核磁共振光谱波谱解析中的应用做一介绍。其最新版本是 ChemDraw ultra 8.0。用户可以在 <http://www.cambridgesoft.com> 下载。该软件支持 ChemDraw、ISIS Sketch、MDL MOL 等格式的有机化学结构式输入, 输入结构后, 点击 structure > 点击 predict 1H-NMR shifts 或 predict 13C-NMR shifts。ChemDraw 即能够根据化学结构式计算出 1H、13CNMR 化学位移值 ( $\delta$ ) 描绘出谱图, 帮助确定化学结构。

## 1 应用 ChemDraw 计算 1HNMR 和 13CNMR 的 $\delta$ 值判定分子构型

通过计算  $\delta$  值可以确定取代烯烃的构型。以曲普立啉为例, 其可能的构型见图 1。

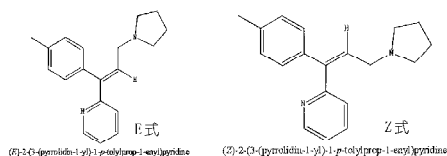


图 1 曲普立啉可能的构型

用 ChemDraw 分别计算其  $\delta$  值, 并与实验值<sup>[1]</sup>比较 (见表 1)。

表 1 曲普立啉 E、Z 式 1HNMR  $\delta$  和

J 的 gNMR 计算值与实验值参数实验值

| 位置      | 实验值 $\delta$ | 计算值  |      |
|---------|--------------|------|------|
|         |              | E 式  | Z 式  |
| 丙烯 2 位氢 | 6.9          | 6.73 | 6.39 |

由表 1 可见,  $\delta$  实验值更接近 E 式计算值, 与实验值符合, 因此说合成的曲普立啉应为 E 式。

## 2 应用 ChemDraw 描绘谱图

还是以曲普立啉为例可以通过 ChemDraw 模拟出其 1HNMR 和 13CNMR 谱图 (见图 2、3)。

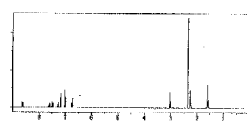


图 2 模拟 1HNMR 谱图

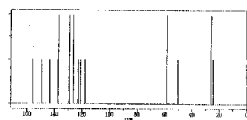


图 3 模拟 13CNMR 谱图

在没有实验谱图的情况下, 通过模拟谱图, 也可以给我们提供“仿真”信息。根据实验值可以看出 ChemDraw 描绘的模拟谱图与实验值吻合较好 (曲普立啉实验值 1HNMR 显示  $\delta$  值 1.88、2.34、2.94、3.39、3.72、3.80、6.90、6.96、7.04 ~ 7.22、7.28、7.60 ~ 7.77、8.58。13CNMR 显示  $\delta$  值 21.258、23.354、52.803、79.035、119.649、123.111、129.254、129.742、133.253、136.714、138.323、147.782、149.196、156.363)。

## 3 应用 ChemDraw 计算 1HNMR 的 $\delta$ 值帮助解析图谱

在实际的图谱解析中, 特别是对 1HNMR 谱有时由于谱线重叠严重, 我们不得不使用各种复杂的经验公式计算后对图谱进行解析。ChemDraw 软件提供的化学位移计算功能是我们从繁琐的查找公式和各种表格中解脱出来, 并且它会给出计算的过程, 有助于我们解析图谱。还是以曲普立啉为例: 其丙烯 2 位氢计算化学位移值为 6.73, 计算过程是基值 (base) = 5.25 (1-乙烯); cis 位 = 0.97; trans 位 = -0.07; gem 位 = 0.58。最后加合得出 6.73。

## 4 小结

ChemDraw 软件功能强大, 计算化学位移只是其一个小插件, 其在测定简单化合物结构时, 计算值与实验值吻合较好。在测定复杂化合物结构时, 氢谱计算值与实验值有较大误差, 碳谱误差要小些。ChemDraw 软件是结构解析的好助手。

## 参考文献

[1] 李素悦, 朱景申. 盐酸曲普立啉的化学结构鉴定[J]. 同济医科大学学报, 2001, 30(2): 142

(收稿日期: 2004-04-23)