

科技期刊中磁共振氢谱图编排实例评析

刘俊英 林本兰

《南京工业大学学报》编辑部, 211800, 南京

摘要 近年来,磁共振(NMR)技术在有机物分子结构表征中的运用越来越普遍,然而科技期刊中NMR图谱的编排格式尚不统一。列举了6种常见的一维磁共振氢谱(^1H NMR)图并加以分析,以期强调科技期刊插图的编排在执行国家标准的基础上应进一步细化要求,并更好地与国际刊物接轨。

关键词 科技期刊;磁共振氢谱;实例

Case analysis of ^1H NMR spectrum formats from scientific journals // LIU Junying, LIN Benlan

Abstract Nuclear magnetic resonance (NMR) technology has been widely used to characterize the structure of various organic molecules in recent years. The spectrum format of NMR published in scientific journals is, however, not standardized. Six popular 1D ^1H NMR spectrum formats from scientific journals were listed and analyzed to demonstrate detail requirements on the spectra illustrated for scientific publications when a national standard is implemented. Those requirements will make Chinese scientific publications be more consistent with international journals.

Keywords scientific journal; nuclear magnetic resonance hydrogen spectrum; case analysis

Authors' address Editorial Board of Journal of Nanjing Tech University, 211800, Nanjing, China

磁共振氢谱(^1H NMR)仪用来记录不同化学环境中氢原子共振吸收电磁波的频率,可以表征有机物分子的结构。近年来,该仪器在科技期刊中出现的频率明显增加^[1-5]。磁共振氢谱仪吸收电磁波的频率不同,频率特征峰出现的位置也不同,峰与峰之间的差距即为化学位移;特征峰的强度(或面积)比则为不同环境氢原子的个数比;其测试结果以谱线形式呈现。论文作者利用图谱中的化学位移、峰的强度(或面积)比等信息,可以推测氢在碳骨架上的位置,从而进一步确定有机物分子的结构式^[6]。读者通过 ^1H NMR图谱可以直观地了解作者的实验结果,更好地理解论文的内容;因此, ^1H NMR图谱是有机物合成科研论文不可或缺的组成部分。目前, ^1H NMR图谱有一维和二维2种,但在科技期刊中一维 ^1H NMR图谱较常见,而且编排格式尚不统一。

本文以科技论文中的一维 ^1H NMR图谱为例,探讨一维 ^1H NMR图谱的编排方法。

1 实例

笔者检索了中国知网数据库中182种期刊,2010

年1月—2014年5月运用磁共振氢谱仪表征分子结构的论文1288篇,涉及农药、医药、精细化工品、印染助剂、橡胶、涂料和功能高分子材料等多个学科领域。综合对比发现一维磁共振氢谱常见的编排格式大体有6种,形式见图1。

根据文献《科技书刊标准化18讲》^{[7]123-124},函数曲线图除图序、图题外,还有纵横坐标轴、标值线、标值、标目和曲线,必要时还需加图注;标目采用“量/单位”的形式。一维 ^1H NMR图谱横坐标的标目为化学位移;图谱曲线为具有特征性峰形的响应谱线,作者在图中多习惯列出相应的分子式,以在特征峰和分子式上均标出——对应的氢位置。因此,笔者认为图1(a)比较全面地展示了一维 ^1H NMR图谱必需的信息,而且编排规范,有机物分子结构表征结果的展示度较好。不论是按照科技书刊标准,还是遵循习惯,图1中的其余图谱与图1(a)相比存在以下不足。

1) 信息或缺少或累赘。图1(b)为所用氢谱仪的记录原图,缺少标目(化学位移 δ)。图中标值下方注上特征峰面积的比值,该值为磁共振仪自带的自动积分仪对各峰面积进行自动积分的数值,对应分子中氢的个数,此数值标在该处易与化学位移值混淆,累赘且不方便阅读。每个峰的化学位移值全部标注在峰的上方,此数值还可从坐标轴上读取,这种标注习惯比较多见。例如,对于傅里叶红外光谱,部分作者也习惯将波数标在对应的波峰上,这样更方便数据获取,此图注可以由编辑根据版面或期刊体例格式统一的需要加以取舍。图中既没有列出分子式,也没有在特征峰上注明氢的位置。此外,横坐标的标值线太密,没有根据标准采用简化形式。仪器可根据测试者的需要,调整设置参数,从而输出个性化的谱图;因此,由仪器自动记录并计算产生描绘谱线的原图直接用作插图时,图不规范,格式也难统一,导致图中信息或缺少或累赘,作者和期刊编辑都要加以重视。期刊编辑可以根据规范加工后使用。

图1(c)也是所用氢谱仪的记录原图,由于仪器型号和参数设置不同,形成了与图1(b)不同格式的图。图1(c)中尽管特征峰上标注了氢的位置,但图中没有列出分子式,氢的位置无法——对应;将频率信号的强度作为纵坐标,且没有加标目,按惯例此坐标可以省略。图1(d)是作者加工后的图谱,图中没列出分子

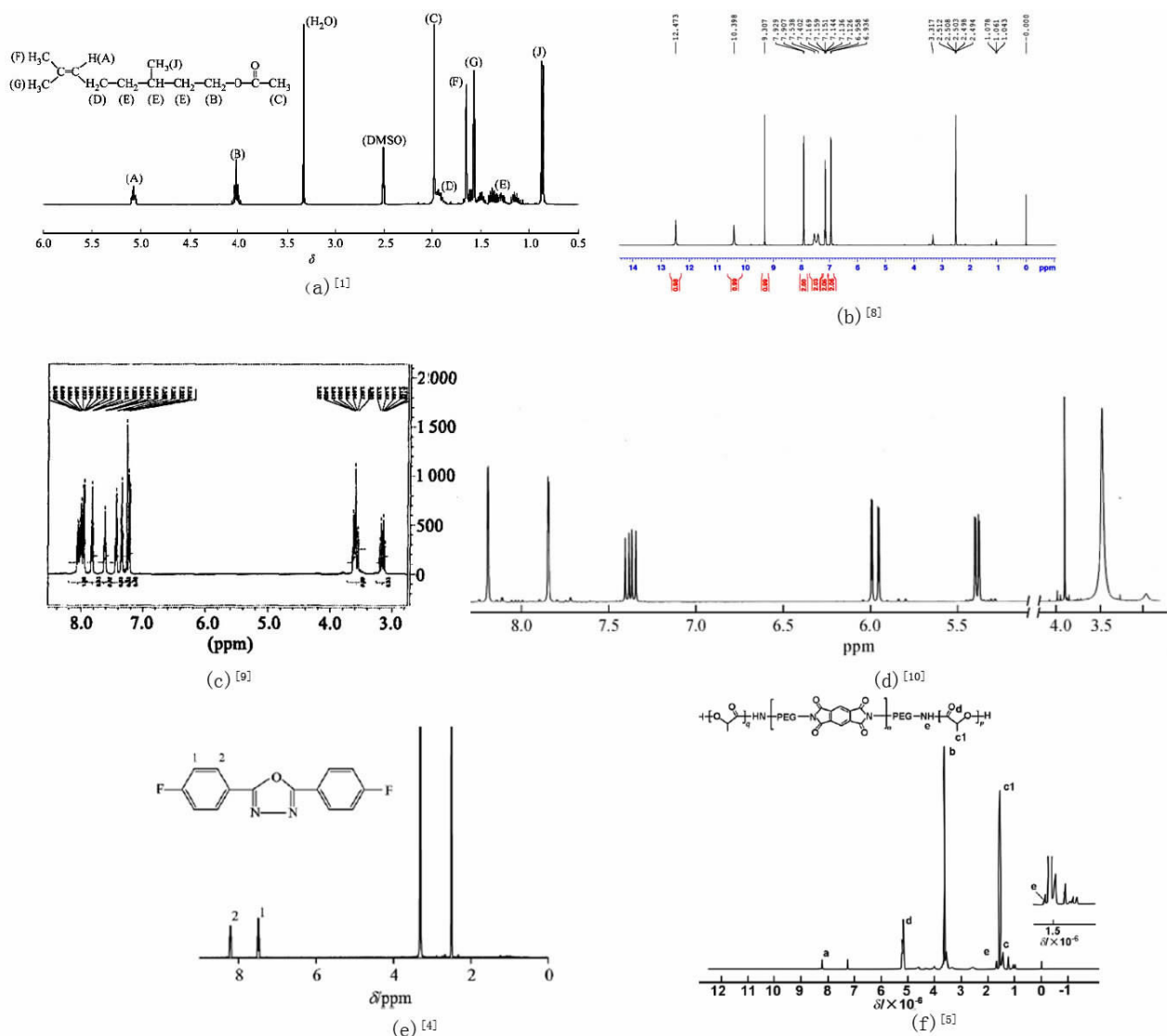


图1 科技期刊中常见的6种 ^1H NMR编排实例

式,特征峰上也没有标注氢的位置,图过于简略,使图失去了自明性。

2) 标目错误。图1(b)、(c)和(d)横坐标以 ppm 直接做标目,缺量名称和(或)量符号;图1(e)和(f)看似所有的信息均齐全,然而,作者和期刊编辑均对标目化学位移理解得不全面,导致单位标注错误。化学位移($\delta = 10^6(\nu - \nu_0) / \nu_0$)是量纲一的量,单位为一,符号为1,在表示量值时一般不用明确写出^{[7]106}。而图1(e)和(f)中化学位移用废弃的定义式 $\delta = (\nu - \nu_0) / \nu_0$ ^{[7]106}定义,得到的量值中含有 10^{-6} ,部分作者用 ppm 来表示 10^{-6} ;所以,误认为图中标目化学位移的单位为 10^{-6} 或 ppm。上述2种情况的作者和期刊编辑均犯了对物理量理解不清而标错标目的错误。

3) 标值间距不等。图1(d)为截去一段坐标轴和曲线后形成的图,坐标断开处前后标值的间距不相等。尽管坐标标值的间距是可以任选的,间距不同,图的形

状不同,作者可以从图面的美观角度来确定。为了增强曲线的对比性,建议在同一幅图中采用等标值间距作图。

2 结束语

上述实例仅是笔者对检索中国知网数据库中的182种科技期刊2010年1月—2014年5月的结果进行不完全统计获得的,实际上科技期刊中 ^1H NMR图谱编排格式不统一的情况比较普遍,应引起作者和编辑的重视。规范、科学的插图,不仅可以为论文作者、期刊编辑和读者之间架起良好的沟通桥梁,还有利于科技期刊更好地展示科技成果。

近年来,现代先进的表征手段与仪器在科学研究中的应用对科技期刊规范编排提出了新的要求;因此,科技期刊编辑要在常规的规范编排的基础上进一步细化,使函数曲线图更准确、清晰地表达科学内容。