

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**ФГАОУ ВО "Новосибирский национальный
исследовательский государственный университет"**

Факультет естественных наук

УТВЕРЖДАЮ



Декан ФЕН НГУ, профессор

Резников В.А.

«29» августа 2014 г.

ЯМР-практикум

**Программа лекционного курса, семинаров и
лабораторной работы студентов**

Курс 1–й, 1-2 семестр

Учебно-методический комплекс

Новосибирск 2014

Учебно-методический комплекс предназначен для студентов I курса факультета естественных наук, направление подготовки 020201 «Фундаментальная и прикладная химия», квалификация (степень) выпускника специалист. В состав пособия включены: программа курса лекций, структура курса, приведен пример задач для самостоятельной работы студентов с использованием учебной литературы и персонального компьютера и даны примеры вариантов задач и теоретические вопросы, встречающиеся на контрольных работах и на зачете.

Составитель:

канд. хим. наук, доц. И. В. Ельцов

© Новосибирский государственный
университет, 2014

Оглавление

Оглавление	3
Введение.	4
1.Цели освоения дисциплины	5
2.Место дисциплины в структуре ООП	6
3.Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «ЯМР-практикум»	7
4.Структура и содержание дисциплины	10
5.Образовательные технологии	15
6.Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.	16
7.Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	17
8.Материально-техническое обеспечение дисциплины	19
Перечень теоретических вопросов к зачету по дисциплине «ЯМР-практикум»	20
Примеры задач на зачете	21

Введение.

Дисциплина «ЯМР-практикум» относится к факультативным дисциплинам математического и естественнонаучного цикла ООП по направлению подготовки 020201 «Фундаментальная и прикладная химия». Дисциплина реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Новосибирский национальный исследовательский государственный университет" (НГУ) кафедрой общей химии.

Содержание дисциплины включает в себя обзор основ ядерного магнитного резонанса, различных экспериментальных методик, их особенностей и областей применения, а также практические занятия по обработке и анализу данных, полученных с использованием спектроскопии ЯМР.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника общекультурных компетенций: ОК-8, ОК-10, ОК-11, профессиональных компетенций: ПК-3, ПК-4, ПК-10, ПК-15.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, лабораторные занятия, домашние задания, консультации, сдача зачета, самостоятельная работа студента.

Результатом прохождения дисциплины является итоговая отметка о получении зачета (недифференцированный зачет).

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль. Формой текущего контроля при прохождении дисциплины «ЯМР-практикум» является контроль посещаемости занятий и прохождения тестов. Также необходимым условием получения зачета является успешное прохождение практикума. В случае пропуска более 2 лабораторных работ студент не может претендовать на получение зачета по дисциплине.

Для того, чтобы быть допущенным к зачету, студент должен выполнить следующее:

- в ходе обучения студент обязан посетить не менее 50% занятий;
- сдать на положительную оценку не менее 60% тестовых заданий;
- выполнить на положительную оценку индивидуальное задание в конце курса.

Итоговый контроль. Итоговую отметку за семестр студент может получить на зачете в конце семестра при условии наличия допуска к зачёту и при условии выполнения задания, полученного на зачёте.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы. Всего 108 академических часов. Программой дисциплины предусмотрены 33 часа лекционных (17 часов в первом семестре и 16 – во втором) и 16 часов лабораторных занятий (второй семестр), 3 часа на прием зачетов и домашнего задания, остальное - самостоятельная работа студентов.

1. Цели освоения дисциплины

Дисциплина «ЯМР-практикум» имеет своей целью формирование у студентов профессиональных научно-исследовательских навыков по использованию метода ядерного магнитного резонанса для установления строения и идентификации соединений. В настоящее время во всем мире широко распространенной практикой в научной среде стало предоставление свободного доступа к приборам исследовательского класса, в том числе и спектрометрам ядерного магнитного резонанса. В результате пользователь должен уметь не только правильно провести пробоподготовку, но и уметь снять спектр и обработать экспериментальные данные. В рамках курса предполагается углубленное знакомство с методом ядерного магнитного резонанса, особенностями регистрации и обработки

данных. На лекциях студентам даются базовые знания по основам метода, разбираются наиболее распространенные методики анализа, даются основные подходы для интерпретации спектральных данных. Во время семинарских занятий студенты разбирают типовые задачи различной сложности, учатся определять по имеющимся спектральным данным структуру соединений, состав и соотношение компонентов в смеси, проверять соответствие структуры и имеющихся данных. На практических занятиях студенты учатся обработке экспериментальных с помощью различных программ. В ходе обучения студенты интенсивно работают с литературой, в том числе и англоязычной, а так же с базами данных, располагающихся в сети Интернет.

Основной целью освоения дисциплины является получение студентами систематизированных знаний об эффекте ядерного магнитного резонанса и возможности его применения в химии, а также приобретения практических навыков использования методов ЯМР-спектроскопии для установления строения органических соединений.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «ЯМР-практикум» относится к факультативным дисциплинам математического и естественнонаучного цикла ООП по направлению подготовки 020201 «Фундаментальная и прикладная химия» для уровня подготовки “специалист”.

Дисциплина «ЯМР-практикум» опирается на следующие дисциплины данной ООП:

- Физическая химия (строение и свойства атома, природа химической связи, химическая реакция, понятия о кинетике и термодинамике реакций, кислотно-основные равновесия);
- Неорганическая химия (строение и свойства атомов, строение молекул, химическая связь);
- Основы компьютерной грамотности (навыки обращения с ПК);

Результаты освоения дисциплины «ЯМР-практикум» могут использоваться в следующих дисциплинах данной ООП:

- Органическая химия;
- Строение вещества;
- Спецпрактикум;
- Методы исследования биополимеров.
- Научно-исследовательская практика;

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «ЯМР-практикум»:

По окончании изучения дисциплины студент должен обладать следующими компетенциями:

общекультурными:

- уметь работать с компьютером на уровне пользователя и способностью применять навыки работы с компьютерами как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности (ОК-8);
- владеть основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, наличием навыков работы с компьютером, как средством управления информацией (ОК-10);
- быть способным использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области информатики и современных информационных технологий, наличием навыков использования программных средств и работы в компьютерных сетях, умением создавать базы специальных данных и использовать ресурсы сети Интернет (ОК-11);

профессиональные компетенции:

- быть способным использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук (ПК-3);
- использованием основных законов естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применением

методов математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ПК-4);

- владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований, свободным владением ими при проведении самостоятельных научных исследований (ПК-10);
- владением методами регистрации и обработки результатов химических экспериментов (ПК-15).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- иметь представление об устройстве и принципах работы спектрометра ядерного магнитного резонанса;
- иметь представление о физико-химических основах метода, причинах возникновения и формах проявления регистрируемого явления;
- знать основы и способы подготовки анализируемого образца;
- знать о том, как проявляются и отличаются в спектральном плане различные структурные группировки молекулы;
- знать основные методики спектроскопии ядерного магнитного резонанса;
- уметь проверять на предмет соответствия структуру и имеющиеся спектральные данные;
- уметь определять по спектральным данным функциональные группировки и заместители, входящие в состав молекулы;
- уметь определять по характеристичным линиям состав смеси;
- уметь пользоваться справочными данными и базами данных, включая базы данных в сети Интернет, для анализа и интерпретации спектральных данных;

- быть способным составить план физико-химического анализа, однозначно подтверждающего структуру органического соединения.
- уметь обрабатывать данные спектроскопии ЯМР с использованием программ XwinNMR, Spinworks, Nuts.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы. Всего 108 академических часов. Из них 36 часов в первом семестре и 72 – во втором семестре. Программой дисциплины предусмотрены 33 часа лекционных (17 часов в первом семестре и 16 – во втором) и 16 часов лабораторных занятий (второй семестр), 3 часа на прием зачетов и домашнего задания, остальное - самостоятельная работа студентов.

№ п/п	Семестр	Тема	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)						Текущий и промежуточный контроль
			Лекция	Лаб. работы	Контр. работа	Дом. задания	Самост. работа	Зачет	
1	1 семестр	Введение в спектроскопию ЯМР	3				2		
2		Физические основы метода	6				4		Гест
3		Особенности эксперимента ЯМР.	8				8		Гест
4							4	1	Зачет
		Итого в 1 семестре		17				18	1
5	2 семестр	Определение строения соединения по спектрам ЯМР	8				12		Тест
6		Обработка данных. Различные программы обработки данных	8	16		1	20		Домашнее задание, Тест
7							6	1	Зачет
		Итого во 2 семестре		16	16		1	38	1
		ИТОГО	33	16		1	56	2	Зачет

Рабочий план

	Неделя	Темы занятий
1 семестр		
СЕНТЯБРЬ	1-2я недели	Лекция 1. Вводная по дисциплине Лекция 2. Введение в спектроскопию ЯМР Знакомство с приборами. Пробоподготовка.
	3-4я недели	Лекция3. Физические основы метода. Начало.
ОКТАБРЬ	1-2я недели	Лекция4. Физические основы метода.
	3-4я недели	Лекция5. Физические основы метода.
НОЯБРЬ	1-2я недели	Лекция 6. Особенности эксперимента ЯМР.
	3-4я недели	Лекция 7. Особенности эксперимента ЯМР. Эксперименты на ядре ^1H .
ДЕКАБРЬ	1-2я недели	Лекция 8. Особенности эксперимента ЯМР. Эксперименты на ядре ^{13}C .
	3-4я недели	Лекция 9. Особенности эксперимента ЯМР. Эксперименты на других ядрах.
	5-я неделя	Зачет
2 семестр		
ФЕВРАЛЬ	1-я неделя	Лекция 10. Определение строения соединения по спектрам ЯМР.
	2-я неделя	Лекция 11. Знакомство со спектрами. Анализ простейших спектров на ядрах ^1H .
	3-я неделя	Лекция 12. Знакомство со спектрами ^{13}C . Анализ спектров на ядрах ^1H , ^{13}C .
	4-я неделя	Лекция 13. Использование данных гетероядерной спектроскопии ЯМР для определения структуры.
МАРТ	1-я неделя	Лекция 14. Особенности эксперимента ЯМР. Обработка данных.
	2-я неделя	Лекция 15. Основные программы по обработке спектров ЯМР. Программа XWin-NMR. Лабораторная работа 1. Программа XWin-NMR.

	3-я неделя	Лабораторная работа 2. Программа XWin-NMR.
	4-я неделя	Лекция 16. Основные программы по обработке спектров ЯМР. Программы Nuts, SPinWork, TopSpin.
АПРЕЛЬ	1-я неделя	Лабораторная работа 3. Программа Nuts.
	2-я неделя	Лабораторная работа 4. Программа SpinWorks.
	3-я неделя	Лабораторная работа 5. Программа TopSpin.
	4-я неделя	Лекция 17. Симуляция спектров.
МАЙ	1-я неделя	Лабораторная работа 6. Программа SpinWorks. Симуляция спектров.
	2-я неделя	Лабораторная работа 7. Программа TopSpin. Симуляция спектров.
	3-я неделя	Лабораторная работа 7. Программа TopSpin. Симуляция спектров.
	4-я неделя	Зачет

Программа курса лекций

Тема 1. Введение в спектроскопию ЯМР

Строение курса. Программа курса. Условия прохождения курса. Требования к литературе, программному обеспечению.

Место ЯМР среди других физических методов исследования органических соединений. Области применения. История метода. Приборы и оборудование. Магнит, датчик, ампулы. Блок-схема спектрометра ЯМР. Эксперимент. Пробоподготовка. Дейтерорастворители. Лок.

Тема 2. Физические основы метода.

Основы теории ЯМР-спектроскопии, спиновое состояние ядер, поведение магнитного момента во внешнем магнитном поле. Магнитные свойства ядер. Эффект Зеемана. Уравнение резонанса. Резонанс в макроскопическом объеме. Спиновое эхо. Уравнение Блоха. Спектр.

Продольная релаксация. Поперечная релаксация. Время релаксации. Механизмы релаксации.

Скалярное взаимодействие. Причины спин-спинового взаимодействия. Спиновое расщепление на нескольких одинаковых соседях. Треугольник Паскаля. Инвариантность мультиплетности относительно последовательности рассмотрения расщепления. Другие примеры спинового расщепления. Случаи с тремя соседями. вырождение дублета дублетов в триплет.

Номенклатура спиновых систем. Двухспиновые системы АВ и АХ. Скалярное взаимодействие с квадрупольными ядрами. Ядерный эффект Оверхаузера.

Тема 3. Особенности эксперимента ЯМР.

Временное и частотное представление спектра. Принципы импульсной ЯМР-спектроскопии с Фурье-преобразованием. Спад свободной индукции (ССИ). Оцифровка сигнала. Частота сигнала. Цифровое разрешение. Динамический диапазон АЦП. Соотношение сигнал/шум. Операции с ССИ. Аподизация. Линейное предсказание. Дополнение нулями. Методология обработки спектра. Информация, содержащаяся в файлах, полученных на приборах фирмы Bruker.

Тема 4. Определение строения соединения по спектрам ЯМР

Понятие об основных параметрах спектра: химический сдвиг, единицы измерения хим. сдвигов, константы спин-спинового взаимодействия (КССВ). Интенсивность сигналов. Внутренние и внешние стандарты. Факторы, определяющие хим. сдвиги: а) Влияние электронной плотности на ядре, б) влияние электронной плотности на соседних атомах в) Магнитная анизотропия атомов и групп, г) влияние водородных связей, д) эффекты растворителя. Спектр.

Спиновое расщепление в протонных спектрах. Спиновое расщепление на ядрах со спином 1. Изотопный сдвиг. Основные протон-протонные КССВ.

Химические сдвиги ^1H . Зависимость от соседствующих атомов и связей, характерные значения. Зависимость химического сдвига от химической природы ядер.

Корреляция структура-спектр.

Эффект "крыши".

Примеры спектров. Алифатические и ароматические протоны. Перекрывание сигналов. Неидеальность формы линии, площади и эффекта крыши.

Отнесение одномерных протонных спектров на основании формы линии и измерения КССВ.

Спектры ЯМР смесей. Выявление подспектров компонентов смеси. Определение количественного состава смеси.

Ядра ^1H . Характеристики ядра. Диапазон хим. сдвигов. Стандарты. Характерные диапазоны химсдвигов основных классов органических соединений. Таблицы хим. сдвигов. Эмпирические константы заместителей. Аддитивные схемы расчета хим. сдвигов алифатических соединений, олефинов, замещенных бензолов. Спин-спиновое взаимодействие и химическое строение: а) геминальные КССВ, б) вицинальные КССВ, в) дальние КССВ. Уравнение Карплуса. Химическая и магнитная эквивалентность ядер. Уточнение параметров спектра. Симуляция. Экспериментальные методы спектроскопии ^1H -ЯМР. Специальные экспериментальные методы в спектроскопии ЯМР. Методы упрощения спектров, подавление, преднасыщение, двойной резонанс, сдвигающие реагенты (шифт-реагенты). Проблемы исследования конформаций. Обменные процессы в спектрах ЯМР: а) внутренняя динамика органических молекул, б) межмолекулярные обменные процессы.

Ядра ^{13}C . Характеристики ядра. Диапазон хим. сдвигов. Стандарты. Характерные диапазоны химсдвигов основных классов органических соединений. Таблицы хим. сдвигов. Эмпирические константы заместителей. Аддитивные схемы расчета хим. сдвигов замещенных бензолов. Константы спин-спинового взаимодействия. Экспериментальные методы спектроскопии ^{13}C -ЯМР. Ядерный эффект Оверхаузера. 1D. Спектр ^{13}C с подавлением ССВ по протонам Broad Band (BB). Спектр ^{13}C с частичным подавлением ССВ по протонам (Off-resonance). Спектр ^{13}C без подавления ССВ. Спектр ^{13}C J-модулированного спинового эхо (JMOD). C-H корреляция на ближних КССВ. C-H корреляция на дальних КССВ. Инверсная спектроскопия. C-C корреляции.

Спектроскопия ЯМР на ядрах ^{19}F . Характеристики ядра. Диапазон хим. сдвигов. Стандарты. Константы ССВ $^{19}\text{F}/^{19}\text{F}$, $^1\text{H}/^{19}\text{F}$, $^{13}\text{C}/^{19}\text{F}$.

Спектроскопия ЯМР на ядрах N. Характеристики ядра. Диапазон хим. сдвигов. Стандарты. Особенности спектроскопии на ядрах азота.

Тема 5. Обработка данных. Различные программы обработки данных.

Программы обработки данных. Сравнение различных программ. Программы Xwin-NMR, Nuts, SpinWork, TopSpin: работа с ССИ, аподизация, Фурье-преобразование, коррекция фазы, коррекция базовой линии, интегрирование, анализ положения сигналов, анализ КССВ, подготовка спектра к печати.

Программы SpinWork, TopSpin: симуляция спектра, задание параметров спиновой системы, итерационный подход к подбору параметров реальной спиновой системы.

Лабораторные работы

Практикум по спектроскопии ЯМР имеет цель научить студентов основным приемам обработки спектральной информации с использованием различного программного обеспечения.

Успешное прохождение практикума является необходимым условием получения зачета. В случае пропуска более 2 лабораторных работ студент не может претендовать на получение зачета по дисциплине.

В ходе лабораторных работ студенты на персональном компьютере занимаются обработкой предоставленных им спектральных данных с использованием соответствующего программного обеспечения. Список программного обеспечения указан в рабочем плане (стр. 10-11).

5. Образовательные технологии

Виды/формы образовательных технологий.

Преподавание курса ведется в виде чередования лекций и лабораторных занятий. Вначале курса проводится интенсивное введение в предмет: первый семестр полностью посвящен теоретическому материалу, затем во втором семестре проводится

практические занятия. По мере чтения лекционного материала студентам предлагаются задачи, требующие интерпретации спектральных данных различной сложности. В дальнейшем на лабораторных занятиях студенты учатся основным приемам обработки данных, и анализу реальных экспериментальных образцов.

Обратная связь обеспечивается тем, что лектор полностью ведет данный курс (в том числе и лабораторные занятия) и может оперативно скорректировать лекционный материал в зависимости от полученных в ходе тестов и совместного решения задач результатов. Решение задач происходит в форме дискуссии преподавателя со студентами (аналог «круглого стола», преподавателю в котором отводится роль ведущего), в ходе которых каждый из участников – студенты или преподаватель имеют право задавать вопросы и участвовать в анализе разбираемой задачи. Таким образом, на занятиях реализуется интерактивная форма обучения.

В конце курса студенту выдается индивидуальное задание для самостоятельной работы, представляющее из себя набор спектральных данных неизвестной молекулы. Студент должен самостоятельно обработать полученные от преподавателя спектры, с использованием справочной литературы, спектральных библиотек и компьютерных баз данных (в том числе и без, расположенных в сети Интернет) расшифровать и определить состав и строение молекулы, сделать ее полное спектральное описание.

Стоит отметить, что преподаватель курса является специалистом в области спектроскопии ЯМР. В связи с этим студентам зачастую предлагается решать не теоретические шаблонные задачи, а реальные, встречающиеся в научной деятельности.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Текущий контроль. Формой текущего контроля при прохождении дисциплины «ЯМР-практикум» является контроль посещаемости занятий и прохождения тестов. Также необходимым

условием получения зачета является успешное прохождение практикума. В случае пропуска более 2 лабораторных работ студент не может претендовать на получение зачета по дисциплине.

Для того, чтобы быть допущенным к зачету, студент должен выполнить следующее:

- в ходе обучения студент обязан посетить не менее 50% занятий;
- сдать на положительную оценку не менее 60% тестовых заданий;
- выполнить на положительную оценку индивидуальное задание в конце курса.

Итоговый контроль. Итоговую отметку за семестр студент может получить на зачете в конце семестра при условии наличия допуска к зачёту и при условии выполнения задания, полученного на зачёте.

Учебно-методическое обеспечение дисциплины: задания для самостоятельной работы студенту выдаются в виде электронных данных. Для решения полученных задач студент может использовать любую справочную литературу, программное обеспечение, спектральные библиотеки и базы данных, доступные ему. В качестве рекомендации ниже приводится следующая литература, доступная в библиотеке НГУ, библиотеках и лабораториях химических институтов СО РАН, а также в сети Интернет:

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература

- Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии: / Ю. А. Пентин, Л. В. Вилков - Москва: Мир, 2003 - 683 с.
- Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992.
- Ельцов И.В. "Компьютерная обработка данных эксперимента ЯМР". Электронное учебное пособие. Новосибирск, НГУ, 2011. URL: http://fen.nsu.ru/posob/gchem/PC_nmr_2011.pdf
- Ельцов И.В. "Спектрометры Bruker". Электронное учебное

пособие. Новосибирск, НГУ, 2012. URL:
<http://fen.nsu.ru/bruker/>

Дополнительная литература.

- Сильверстейн Р., Басслер Г., Моррил Т. Спектрометрическая идентификация органических соединений. М.: Мир, 1977. – 590 с.
- Керрингтон А., Мак-Лечлан Э. Магнитный резонанс и его применение в химии. М. Мир 1970г.
- Б.И. Ионин, К.П. Брыляков. Основы импульсной ЯМР-спектроскопии. Новосибирск: НГУ. 2002.
- Преч, Ф. Бюльманн, К. Аффольтер. Определение строения органических соединений. М.: Мир, 2006.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы.

1. База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений. Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
2. База данных Национального института современной индустриальной науки и технологии, Япония. Режим доступа: http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi
3. Программное обеспечение: Aldrich/ACD Library of FT NMR Spectra.
4. Программное обеспечение: ACD/Labs со встроенным генератором спектров ЯМР.
5. Программное обеспечение: ChemOffice со встроенным генератором спектров ЯМР.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- В качестве технического обеспечения лекционного процесса используется мультимедийный проектор, доска.
- Для демонстрации иллюстрационного материала используется программа Microsoft Power Point 2007.
- Для проведения практических занятий по знакомству с базами данных используется компьютер. Количество компьютеров - не менее 1 компьютера на двух студентов.

Проведение зачета обеспечивается печатным раздаточным материалом

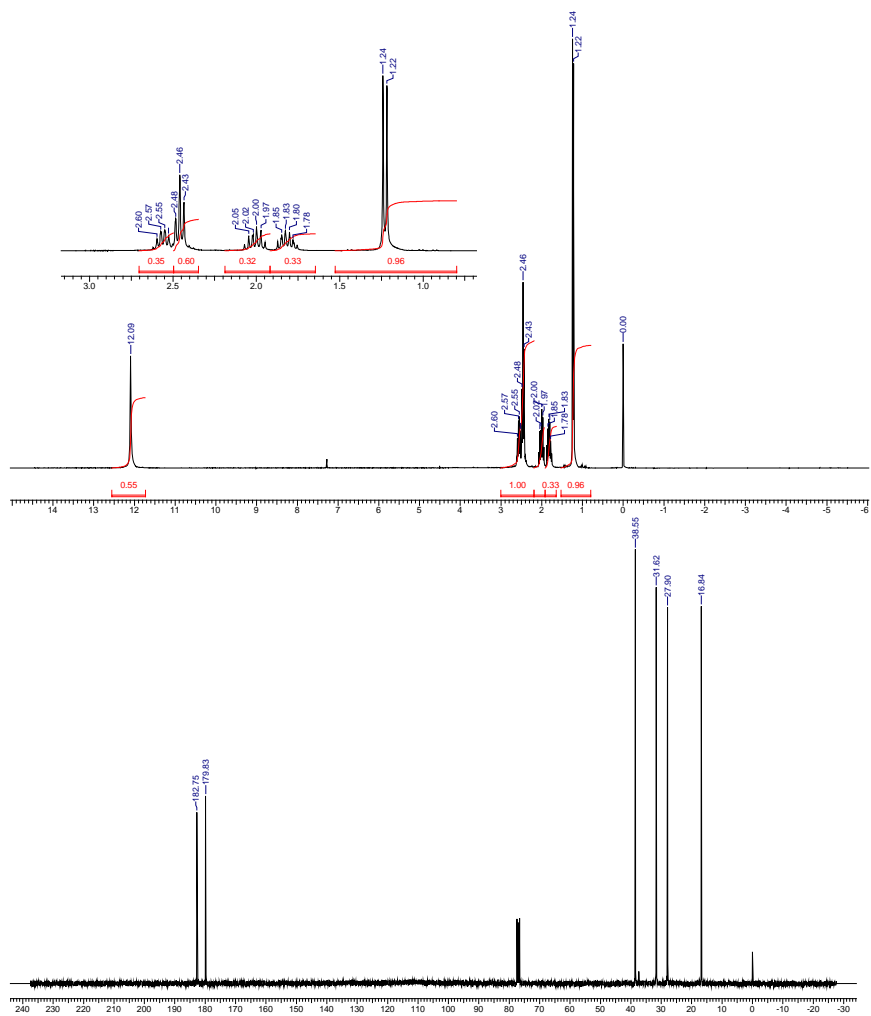
**Перечень теоретических вопросов к зачету по дисциплине
«ЯМР-практикум»**

1. Пробоподготовка в ЯМР.
2. Спектр ЯМР: интенсивности, шкала, частота.
3. Шкала ЯМР. Стандарты. Хим. сдвиги.
4. Характеристичность частот в спектрах ^1H ЯМР.
5. Спин-спиновое взаимодействие. Мультиплетность.
6. Химическая и магнитная эквивалентность.
7. Номенклатура спиновых систем.
8. Стандарты в ^1H ЯМР.
9. Стандарты в ^{13}C ЯМР.
10. Стандарты в ^{19}F ЯМР.
11. Пересчет величин хим. сдвигов для шкал с различными стандартами.
12. Одномерные экспериментальные методы спектроскопии ^{13}C -ЯМР.
13. Одномерные экспериментальные методы спектроскопии ^1H -ЯМР.
14. Двумерные экспериментальные методы спектроскопии ^{13}C -ЯМР.
15. Двумерные экспериментальные методы спектроскопии ^1H -ЯМР.
16. Ядерный эффект Оверхаузера.
17. Механизмы релаксации.
18. Расчет хим. сдвига сигналов в замещенных бензолах.

Примеры задач на зачете:

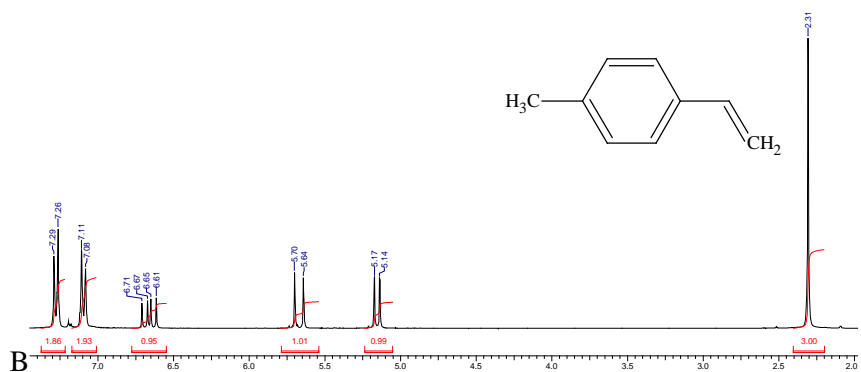
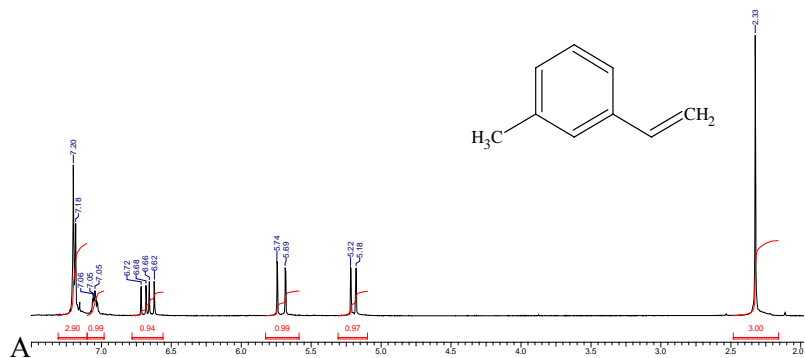
Задача 1.

На полке с реактивами стояла старая банка с каким-то белым порошком. На потертой этикетке значилась загадочная надпись «...овая кислота». На основании спектра ЯМР определите, что это за кислота. Сделайте отнесение сигналов, объясните спектр.

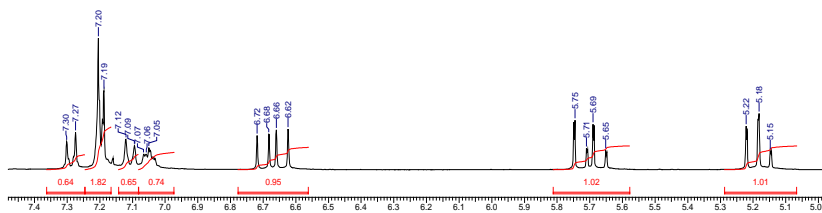


Задача 2.

На основании спектров А и В определить состав смеси в спектре С

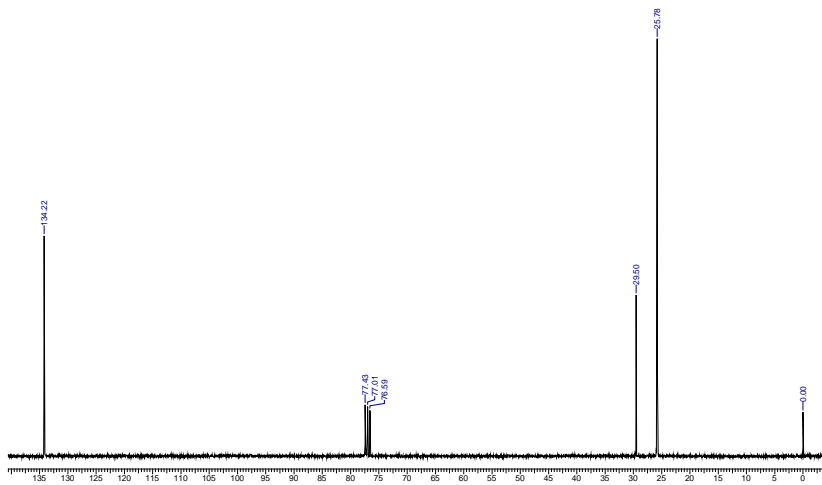
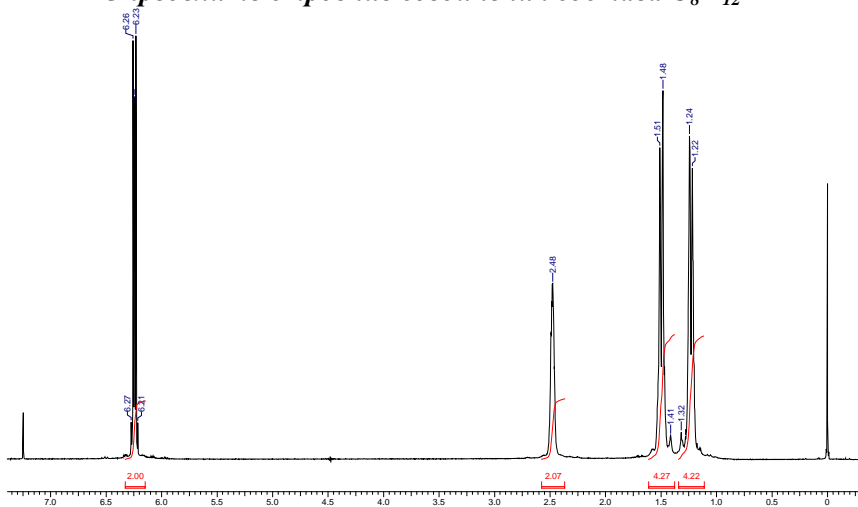


C



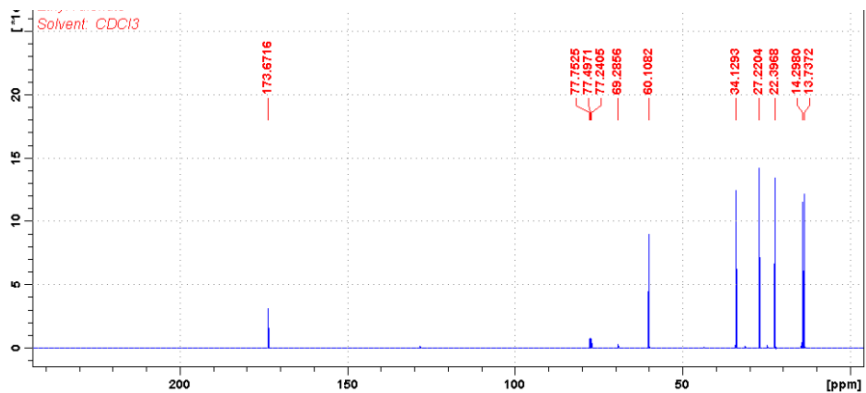
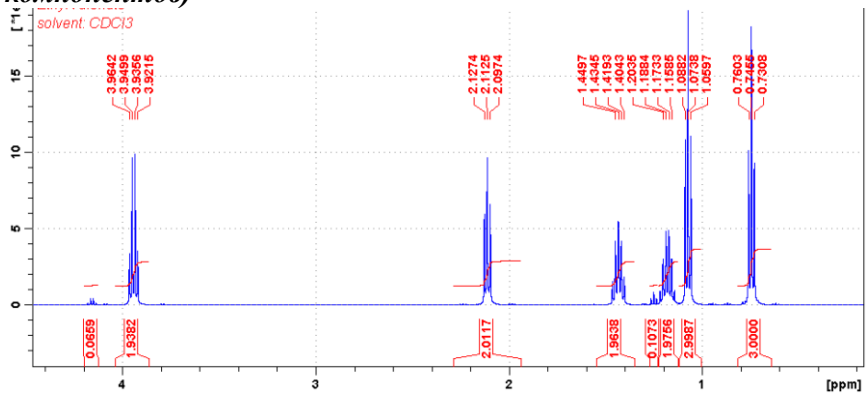
Задача 3.

Определить строение соединения состава C_8H_{12}

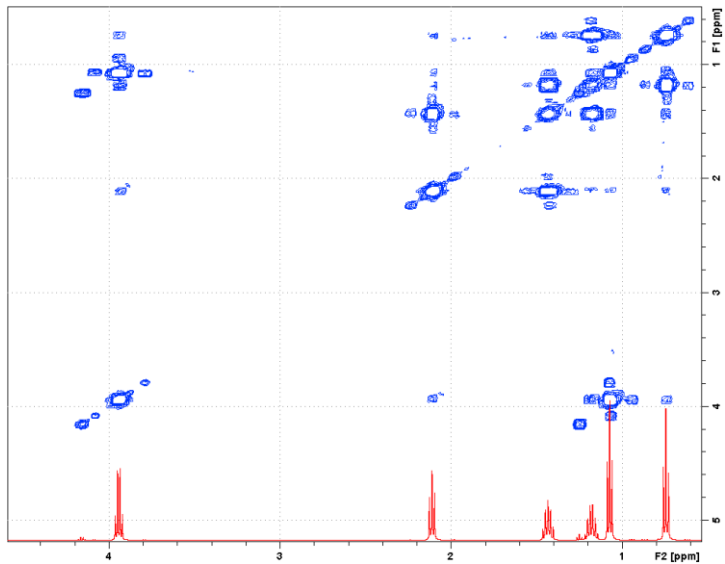


Задача 4.

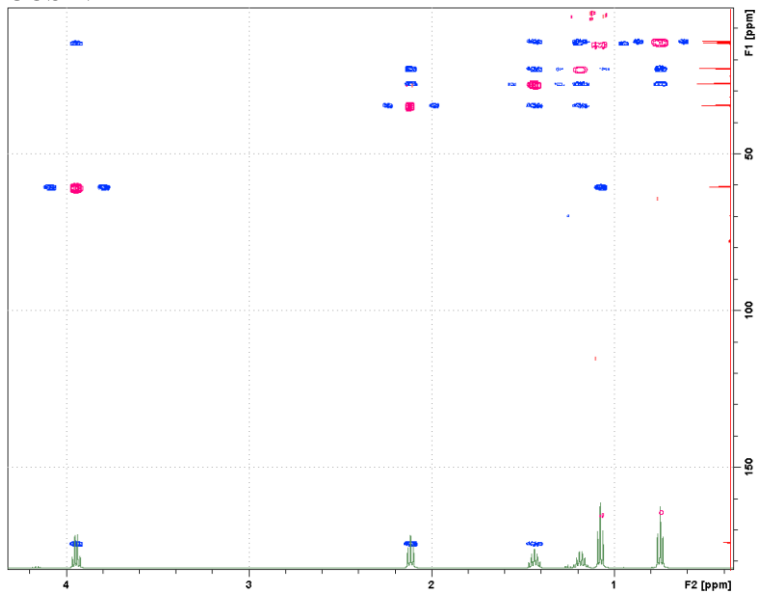
Определить состав смеси (строение и содержание компонентов)



Задача 4.



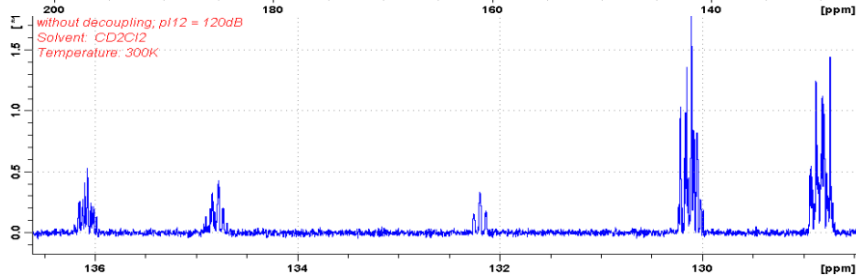
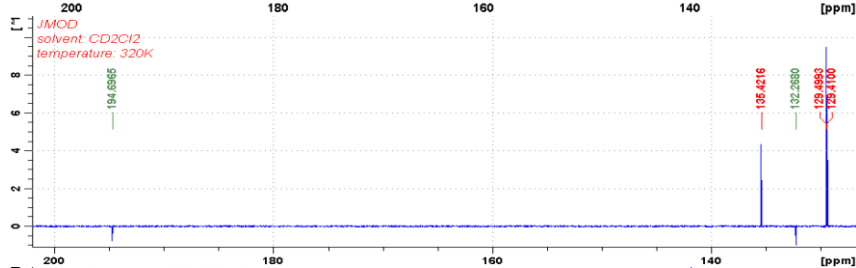
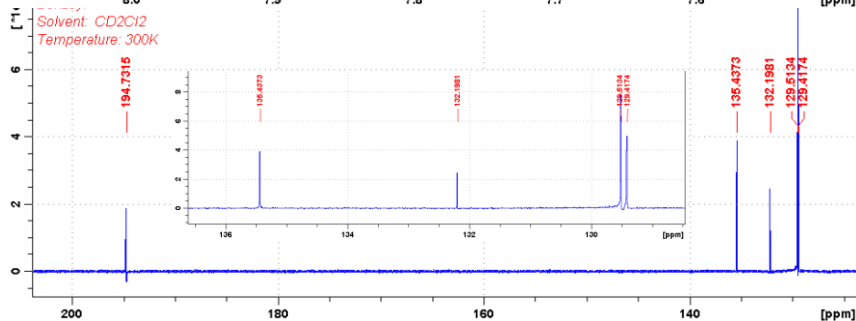
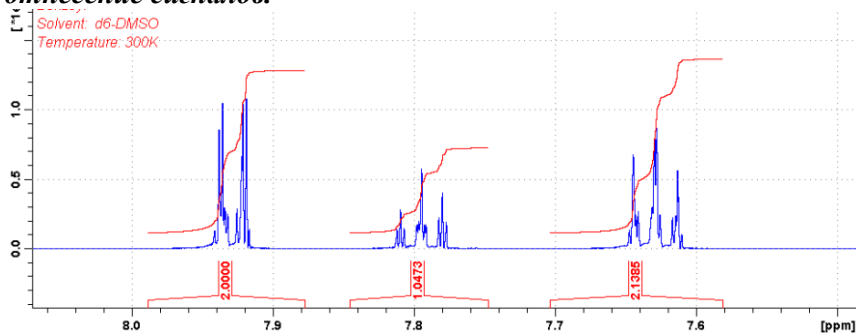
COSY.

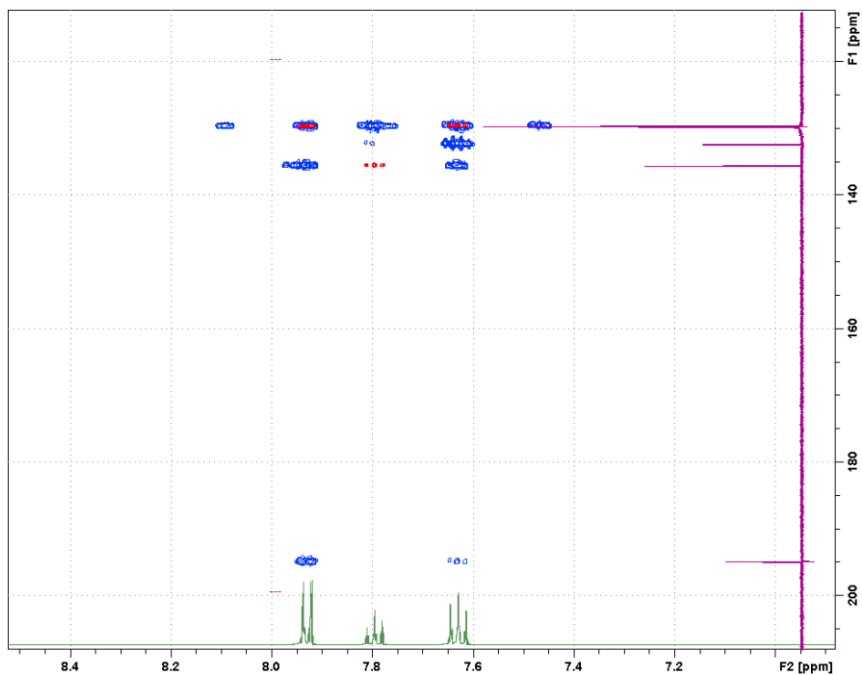


Синий – спектр НМВС (ближнее и дальнее СН-взаимодействие),
красный – HSQC (прямое взаимодействие СН)

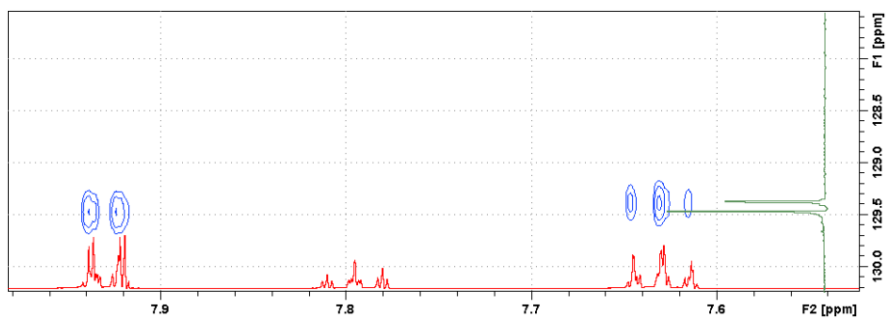
Задача 5.

Определить строение соединения. Сделать полное отнесение сигналов.



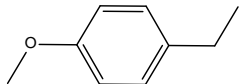


Синий – спектр НМВС (ближнее и дальнее СН-взаимодействие),
 красный – HSQC (прямое взаимодействие СН)



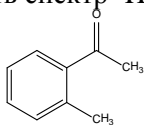
Задача 6.

Изобразить ^1H и ^{13}C (ВВ) спектры соединения. Указать мультиплетность.



Задача 7.

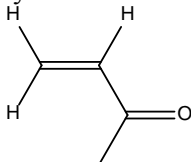
Изобразить спектр ^1H - и ^{13}C (JMOD) следующего соединения в



метаноле.

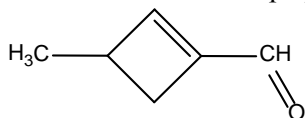
Задача 8.

Изобразить спектр ^1H следующего соединения. Указать мультиплетность сигналов. Оценить КССВ.



Задача 9.

Изобразить спектр ^1H - и ^{13}C (JMOD) следующего соединения в хлороформе. Указать мультиплетность.



Задача 10.

Изобразить спектр ^1H - и ^{13}C (JMOD) следующего соединения в хлороформе. Указать мультиплетность.

