

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

"НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ"

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по учебной работе

\_\_\_\_\_ САБЛИНА С.Г.

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г

УЧЕБНЫЙ КУРС

«ЯМР-практикум»

Кафедра общей химии

**Лектор – к.х.н., доцент И.В. Ельцов**

Новосибирск  
2012 г.

Учебный курс ориентирован на студентов III-IV курса факультета естественных наук, специальность «химия». 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.

Составители:  
Ельцов И.В., доц.

Учебный курс подготовлен в рамках реализации *Программы развития государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Новосибирский государственный университет»* на 2009 – 2018 годы

© Новосибирский государственный университет, 2012

## Оглавление

Аннотация рабочей программы.....	4
1. Цели освоения дисциплины.....	4
2. Место дисциплины в структуре ООП .....	5
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «ЯМР-практикум»:.....	6
4. Структура и содержание дисциплины.....	7
Рабочий план .....	8
Программа курса лекций .....	9
5. Образовательные технологии .....	11
6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины. ....	11
Рекомендованная литература. ....	12
Программное обеспечение и Интернет-ресурсы. ....	12
Перечень теоретических вопросов к зачету по дисциплине «ЯМР-практикум».....	13
Примеры задач на зачете: .....	14
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.....	22
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины .....	23

## Аннотация рабочей программы

Дисциплина «ЯМР-практикум» является частью химического цикла ООП по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ» в области, касающейся вариативной части математического и естественно-научного цикла. Дисциплина реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования Новосибирский 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-5, ОК-7, ОК-9, ОК-10, профессиональных компетенций: ПК-2, ПК-3, ПК-8.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические 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 сдача домашних заданий. Всего в течение семестра студент получает не менее 30 заданий для самостоятельной работы различной сложности.

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

- в ходе обучения студент обязан посетить не менее 50% занятий;
- представить в письменном виде не менее 60% правильно решенных домашних заданий.

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 2 зачетных единиц. Всего 72 академических часа. Программой дисциплины предусмотрены 12 часов лекционных, 6 часов семинарских занятий, 12 часов практических занятий, 24 часа прохождения контрольных точек в течение семестра (включая домашние задания), а также 18 часов самостоятельной работы 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» является частью математического и естественнонаучного цикла ООП, вариативная (профильная) часть профессионального цикла по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ», уровень подготовки – «бакалавр».

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

- Физика (электромагнитное излучение, кулоновское взаимодействие, дифракция)
- 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);
- Органическая химия (классификация и номенклатура соединений, строение молекул, донорно-акцепторные свойства заместителей, изомерия)
- Основы компьютерной грамотности (навыки обращения с ПК);
- Строение вещества (природа химической связи, молекулярная орбиталь; возбужденное состояние, электронные переходы)

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

- Научно-исследовательская практика;
- Специальные методы синтеза органических соединений;
- Методы исследования биополимеров.

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

- **общекультурные компетенции:**
  - умение логически верно, аргументировано и ясно строить устную и письменную речь (ОК-5);
  - умение работать с компьютером на уровне пользователя и способность применять навыки работы с компьютером как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности (ОК-7);
  - владение основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыки работы с компьютером как средством управления информацией (ОК-9);
  - способность работать с информацией в глобальных компьютерных сетях (ОК-10);
- **профессиональные компетенции:**
  - владение основами теории фундаментальных разделов органической химии (ПК-2);
  - способность применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных (ПК-3);
  - владение методами регистрации и обработки результатов химически экспериментов (ПК-8);

#### **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 2 зачетных единицы. Всего 72 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)								Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)	
				Лекция	Семинарские занятия	Практические занятия	Контр. работа	Коллоквиумы	Домашние задания	Самост. работа	Зачет		Экзамен
1.1.	Введение в спектроскопию ЯМР	7	1-3	6						6			
1.2.	Определение строения соединения по спектрам ЯМР	7	4-11	6	6	4			14	8			Домашнее задание
1.3.	Различные программы обработки данных.	7	12-15			8			8	4			Домашнее задание
1.4.	Зачет	7	16								2		Зачет
	<b>Итого</b>			<b>12</b>	<b>6</b>	<b>12</b>			<b>22</b>	<b>18</b>	<b>2</b>		

### Рабочий план

	Неделя	Темы занятий
<b>СЕНТЯБРЬ</b>	1-я неделя	<b>Лекция 1.</b> Введение в спектроскопию ЯМР, знакомство с приборами. Пробоподготовка.
	2-я неделя	<b>Лекция 2.</b> Физические основы метода
	3-я неделя	<b>Лекция 3.</b> Особенности эксперимента ЯМР. Обработка данных.
	4-я неделя	<b>Практическое занятие 1.</b> Основные программы по обработке спектров ЯМР. Программа XWin-NMR.
<b>ОКТЯБРЬ</b>	1-я неделя	<b>Практическое занятие 2.</b> Программа XWin-NMR.
	2-я неделя	<b>Лекция 4.</b> Знакомство со спектрами. Анализ простейших спектров на ядрах $^1\text{H}$ .
	3-я неделя	<b>Семинар 1.</b> Знакомство со спектрами. Анализ простейших спектров на ядрах $^1\text{H}$ .
	4-я неделя	<b>Лекция 5.</b> Спектроскопия ЯМР на ядрах $^1\text{H}$ .
<b>НОЯБРЬ</b>	1-я неделя	<b>Лекция 6.</b> Спектроскопия ЯМР на ядрах $^{13}\text{C}$ , $^{19}\text{F}$ и др.
	2-я неделя	<b>Семинар 2.</b> Знакомство со спектрами $^{13}\text{C}$ . Анализ спектров на ядрах $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$ .
	3-я неделя	<b>Семинар 3.</b> Использование данных гетероядерной спектроскопии ЯМР для определения структуры.
	4-я неделя	<b>Практическое занятие 3.</b> Программа XWin-NMR.
<b>ДЕКАБРЬ</b>	1-я неделя	<b>Практическое занятие 4.</b> Программа Nuts.
	2-я неделя	<b>Практическое занятие 5.</b> Программа SpinWorks.
	3-я неделя	<b>Практическое занятие 6.</b> Программа SpinWorks. Симуляция спектров.
	4-я неделя	<b>Зачет.</b>



## Программа курса лекций

### *Лекция 1. Ядерный магнитный резонанс.*

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.

### *Лекция 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.

### *Лекция 3. Особенности эксперимента ЯМР. Обработка данных.*

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.

### *Лекция 4. Знакомство со спектрами. Анализ простейших спектров на ядрах $^1\text{H}$ .*

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  $^1\text{H}$ . 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.

### ***Лекция 5. Спектроскопия ЯМР на ядрах $^1\text{H}$ .***

Ядра  $^1\text{H}$ . 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  $^1\text{H}$ -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  $^{13}\text{C}$ . 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  $^{13}\text{C}$ -ЯМР. Ядерный эффект Оверхаузера. 1D. Спектр  $^{13}\text{C}$  с подавлением ССВ по протонам Broad Band (BB). Спектр  $^{13}\text{C}$  с частичным подавлением ССВ по протонам (Off-resonance). Спектр  $^{13}\text{C}$  без подавления ССВ. Спектр  $^{13}\text{C}$  J-модулированного спинового эхо (JMOD). С-Н корреляция на ближних КССВ. С-Н корреляция на дальних КССВ. Инверсная спектроскопия. С-С корреляции.

Спектроскопия ЯМР на ядрах  $^{19}\text{F}$ . 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  $\text{N}$ . Характеристики ядра. Диапазон хим. сдвигов. Стандарты. Особенности спектроскопии на ядрах азота.

### ***Семинары.***

Ознакомление студентов с принципами решения задач по ядерному магнитному резонансу (расчету параметров спектра, отнесения резонансных сигналов, сборка молекулы по структурным фрагментам). Самостоятельное решение задач по спектроскопии протонного магнитного резонанса.

Анализ спектров ЯМР  $^{19}\text{F}$  и  $^{13}\text{C}$ . Определение параметров спектров. Самостоятельное решение задач.

## **5. Образовательные технологии**

### Виды/формы образовательных технологий.

Преподавание курса ведется в виде чередования лекций, семинарских и практических занятий. Вначале курса проводится интенсивное введение в предмет (первые три недели семинары полностью заменены лекциями), затем проводится практические занятия, на которых студенты учатся основным приемам обработки данных, не углубляясь в содержательную часть спектра. Затем, по мере чтения лекционного материала, студентам предлагаются задачи, требующие как обработки, так и интерпретации спектральных данных различной сложности.

Обратная связь обеспечивается тем, что лектор ведет также и семинарские занятия и может оперативно скорректировать лекционный материал в зависимости от полученных на семинарских и практических занятия результатах в усвоении материала. Более того, такая форма преподавания позволяет более гибко подходить к разделению занятий на лекционные и семинарские: после прохождения какой-то части лекционного материала его можно сразу же закрепить решением нескольких задач. И наоборот, в случае возникновения какого-то недопонимания со стороны студентов часть семинарского занятия можно превратить в лекцию с тем, чтобы детальней рассказать о возникшей проблеме. Семинарские занятия происходят 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 семинарских занятиях реализуется интерактивная форма обучения.

В течение семестра по мере обучения студенту выдаются задания для самостоятельной работы, представляющие из себя набор спектральных данных неизвестной молекулы. Студент должен самостоятельно, 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. Всего за семестр студент получает не менее 30 подобных задач, затрагивающих различные физико-химические методы анализа.

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. Также приветствуется решение реальных научных задач, возникающих перед студентом в ходе прохождения им научно-исследовательской практики.

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

Формой текущего контроля при прохождении дисциплины «ЯМР-практикум» является контроль посещаемости занятий и сдача домашних заданий и написание контрольных работ.

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

- в ходе прохождения дисциплины посетить не менее 50% занятий;
- правильно решить не менее 60% полученных домашних;

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 печатных материалов и/или 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 приводится следующая литература, доступная в библиотеке НГУ, библиотеках и лабораториях химических институтов СО РАН, а также в сети Интернет:

#### **Рекомендованная литература.**

1. А. Гордон, Р. Форд. Спутник химика. М.: Мир, 1976.
2. Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Аффольтер. Определение строения органических соединений. М.: Мир, 2006.
3. Альманах компании Bruker. 2010.

#### **Программное обеспечение и Интернет-ресурсы.**

4. База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений. Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
5. 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](http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi)
6. Программное обеспечение: Aldrich/ACD Library of FT NMR Spectra.
7. Программное обеспечение: ACD/Labs со встроенным генератором спектров ЯМР.
8. Программное обеспечение: ChemOffice со встроенным генератором спектров ЯМР.

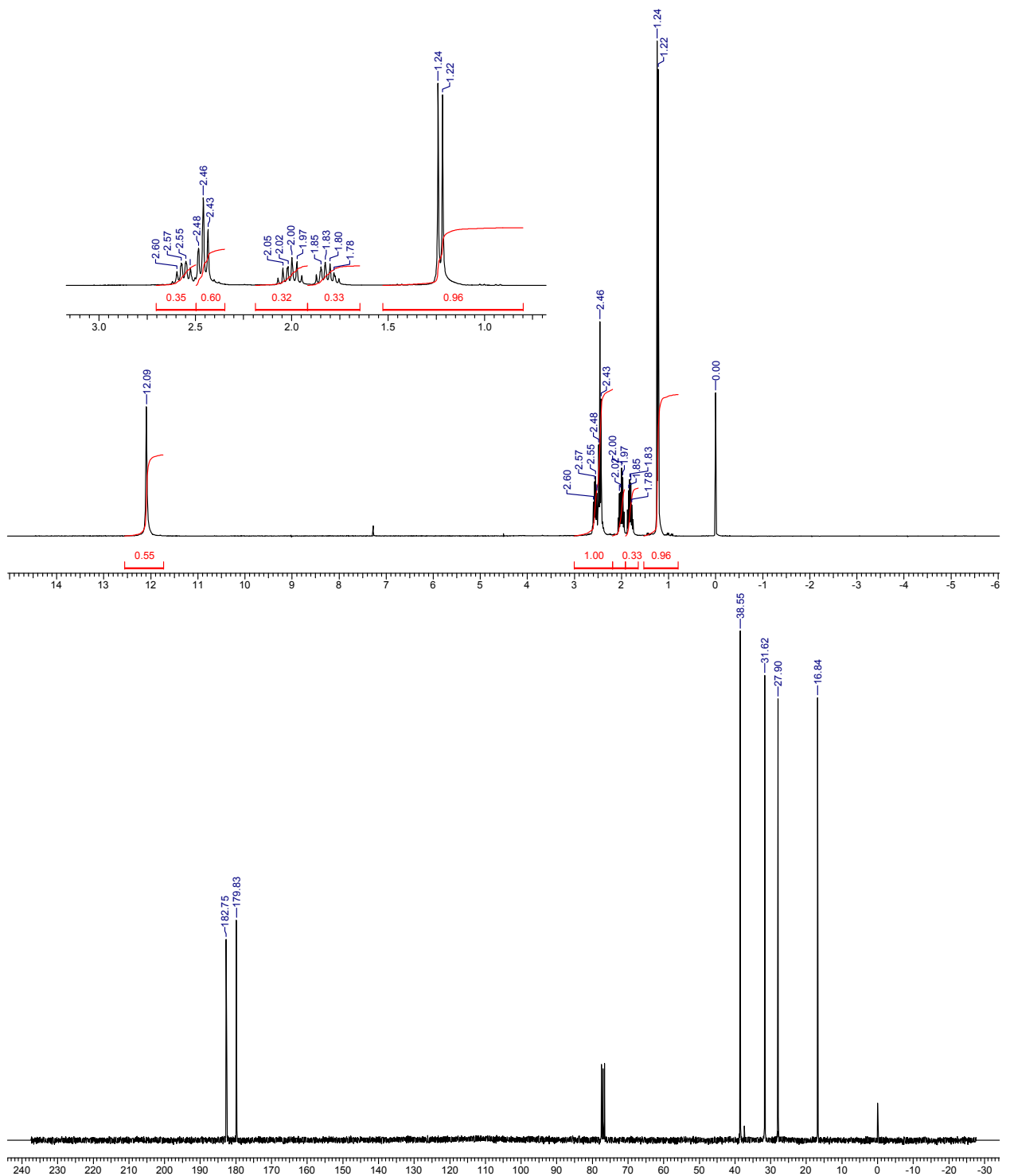
## Перечень теоретических вопросов к зачету по дисциплине «ЯМР-практикум»

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

## Примеры задач на зачете:

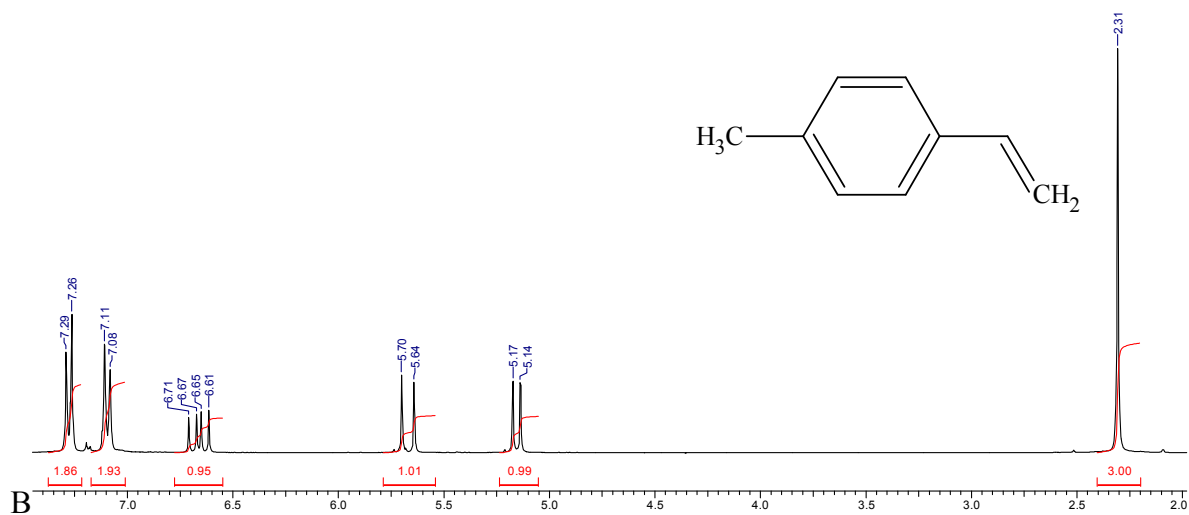
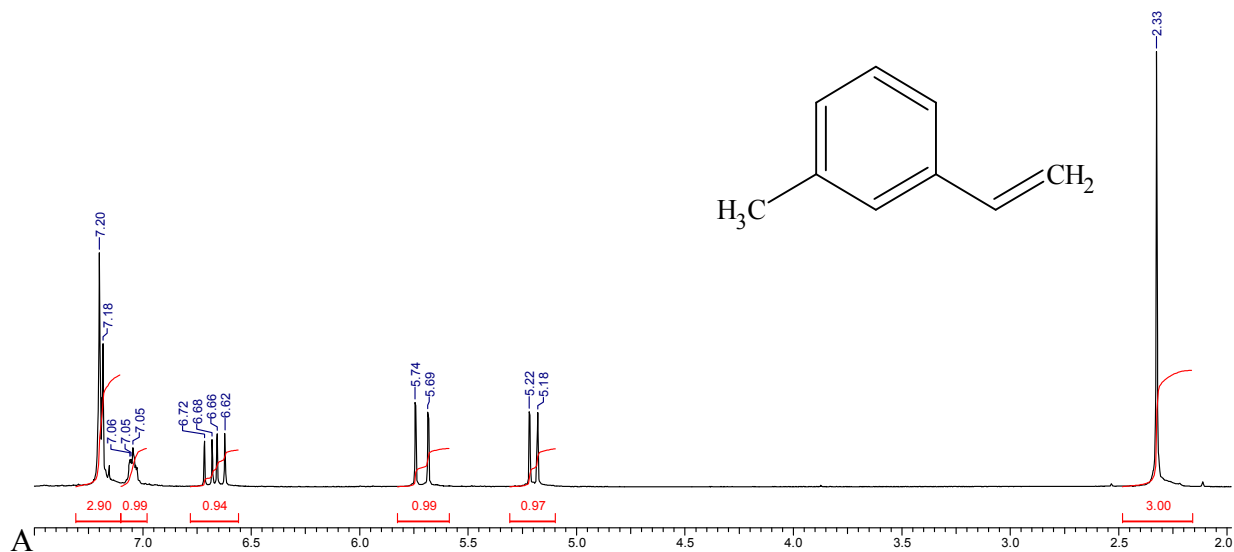
### Задача 1.

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.

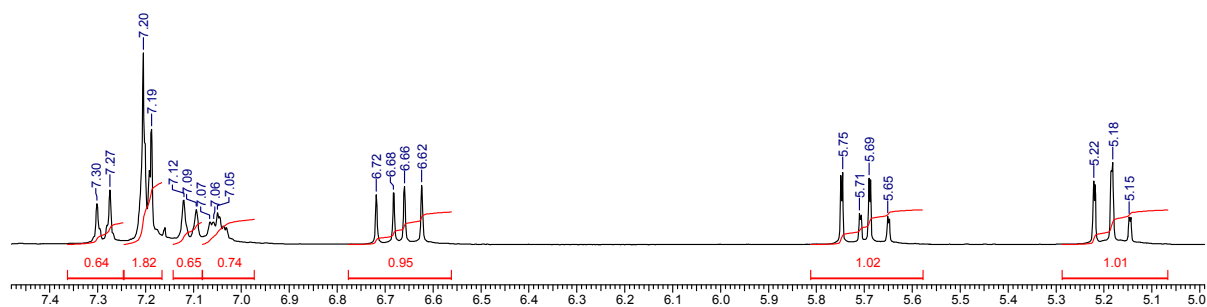


**Задача 2.**

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

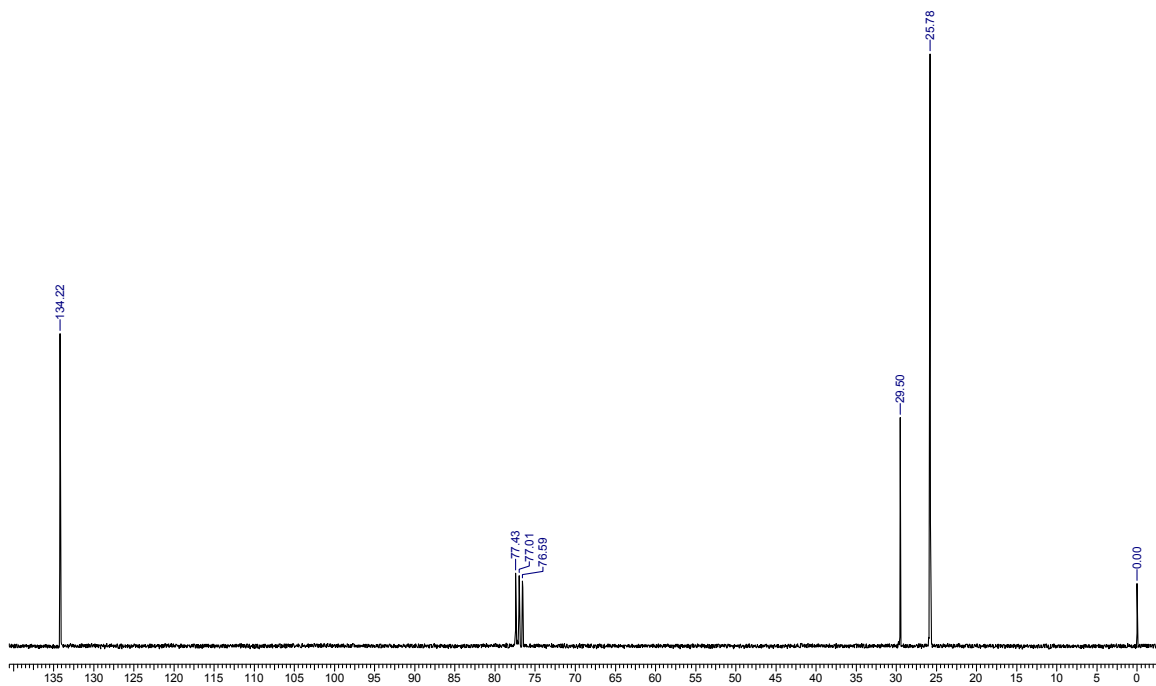
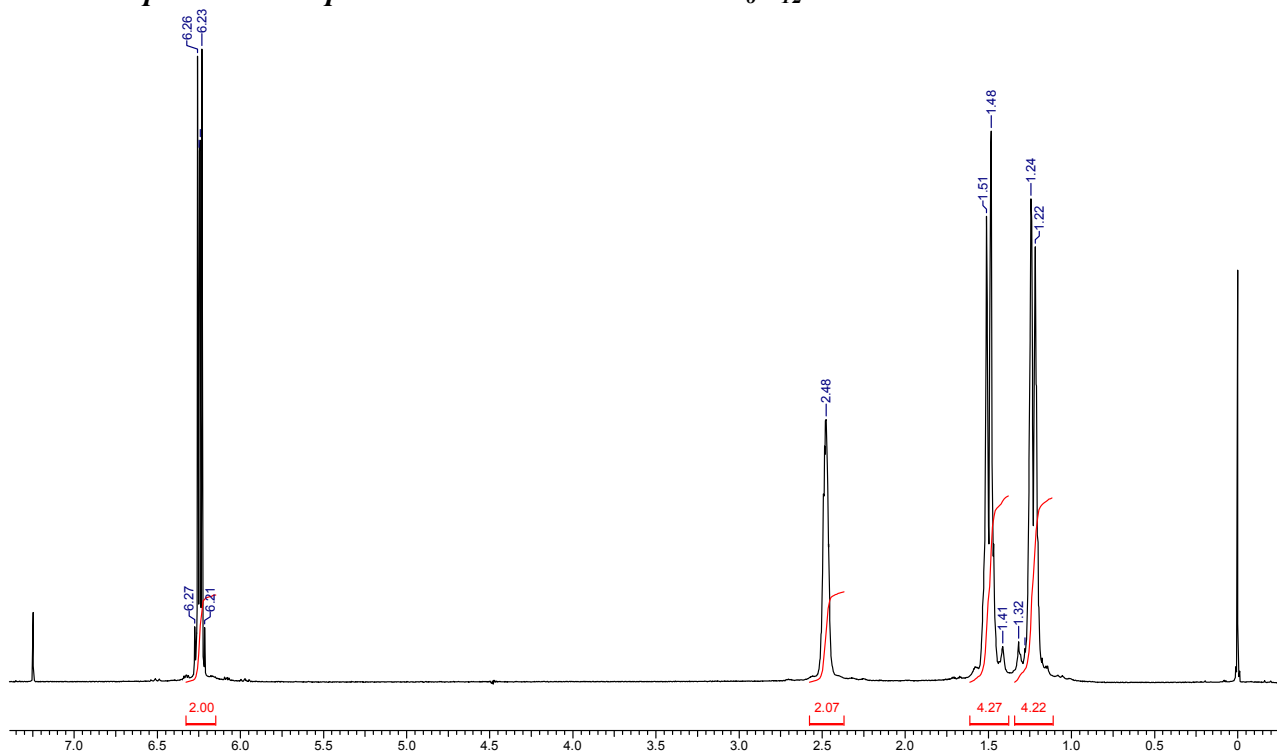


**C**



Задача 3.

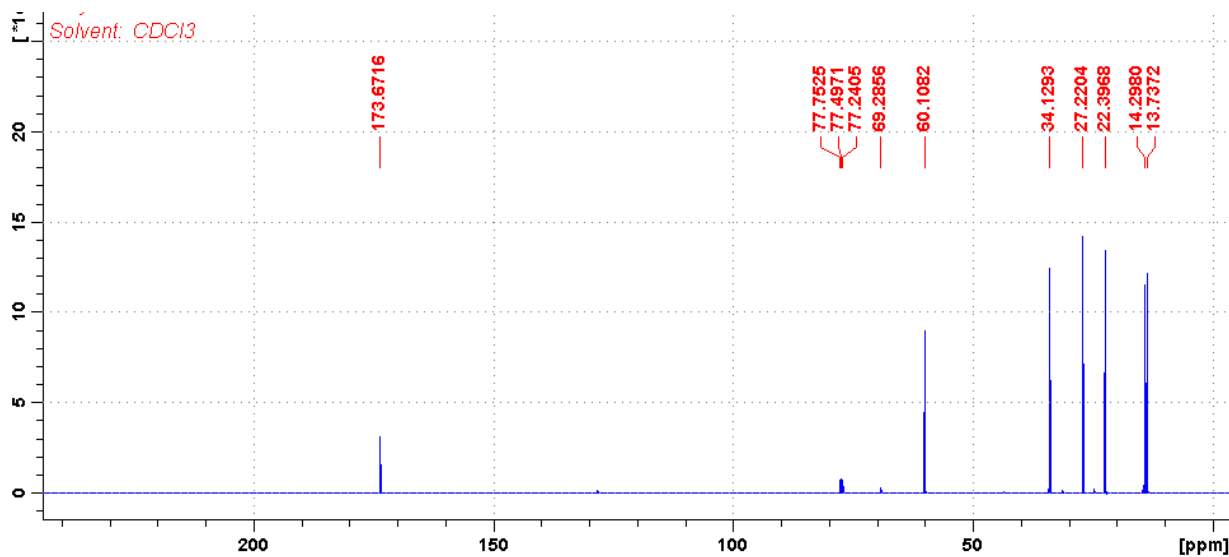
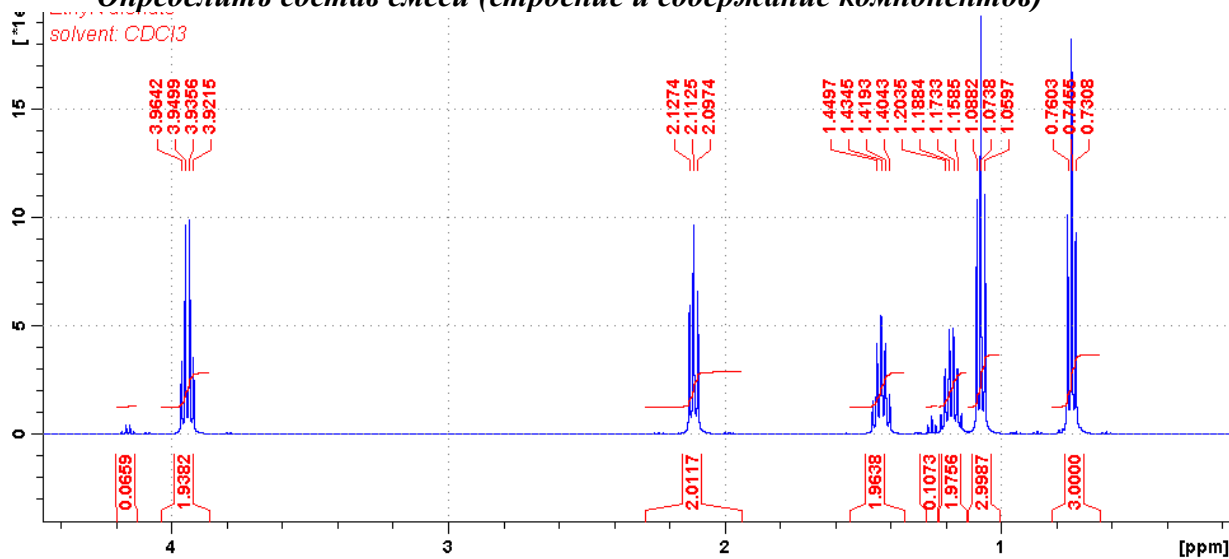
Определить строение соединения состава  $C_8H_{12}$



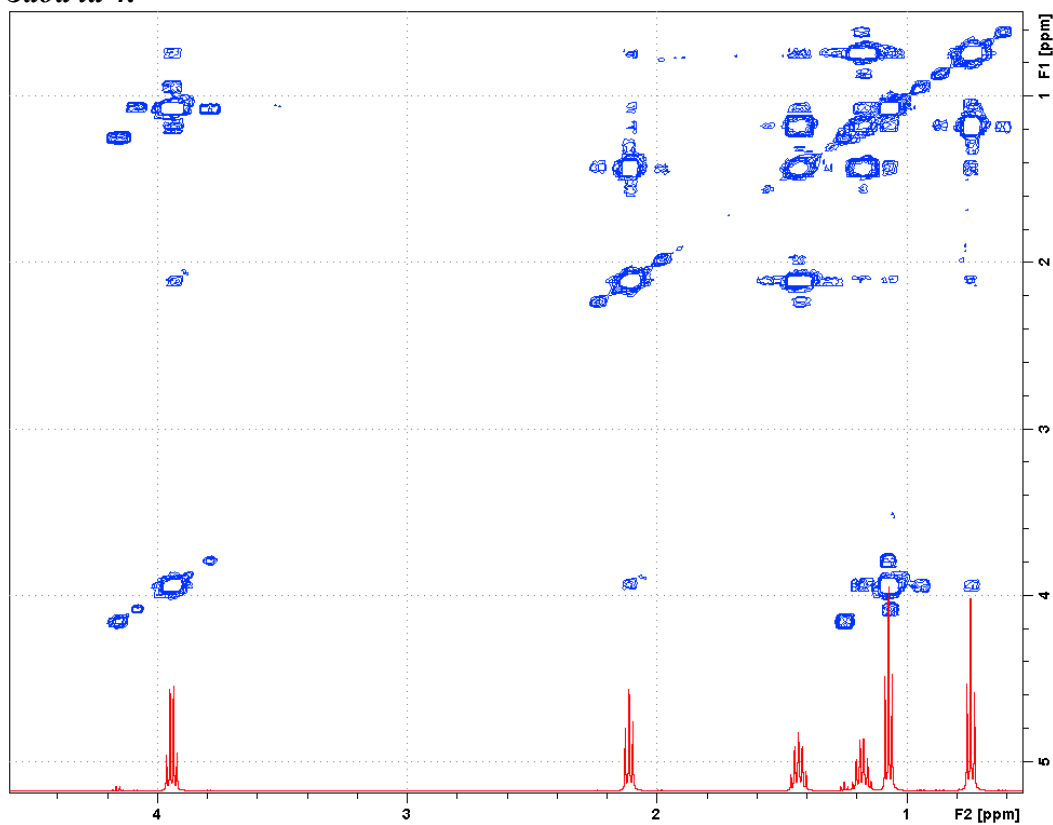


#### Задача 4.

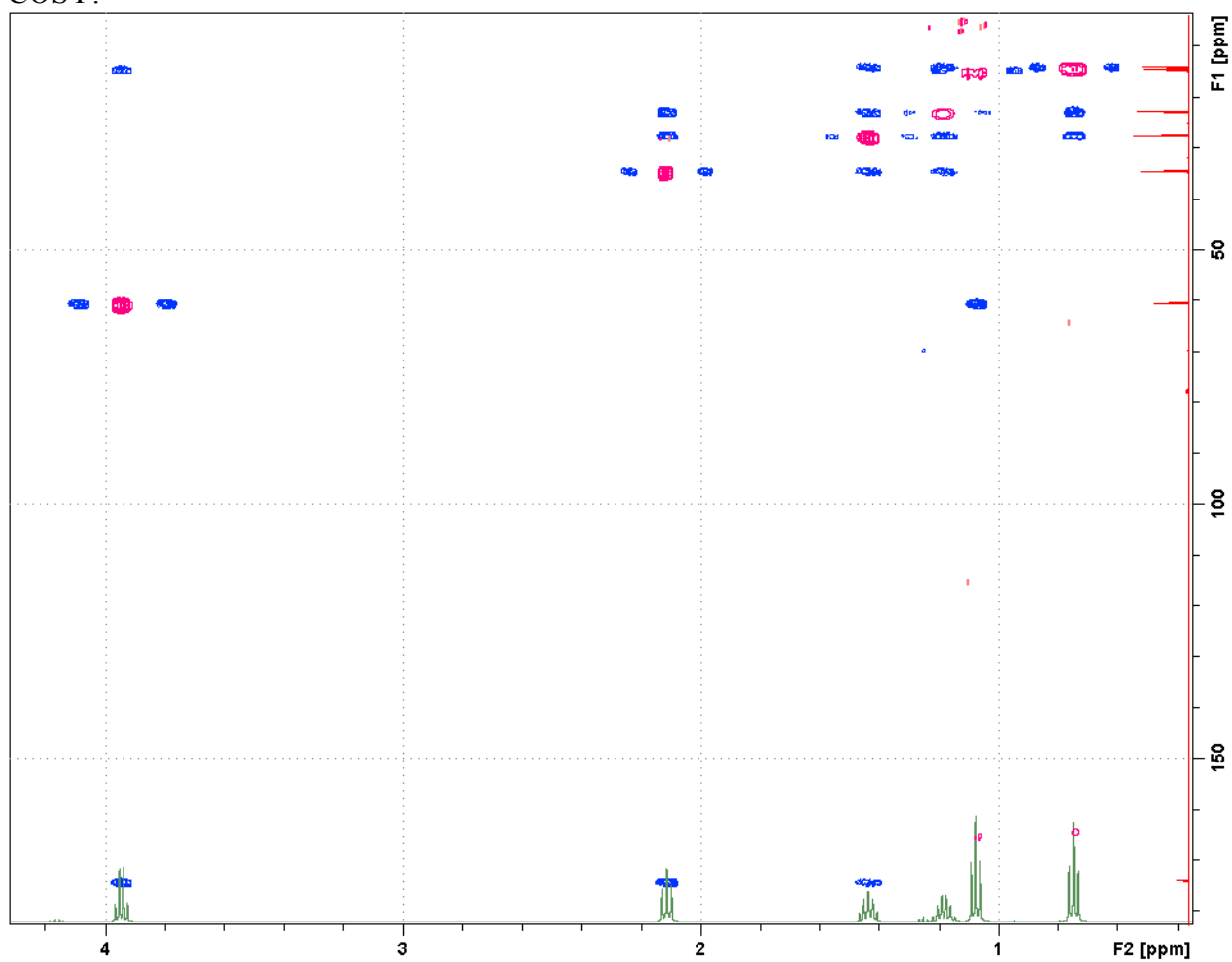
Определить состав смеси (строение и содержание компонентов)



Задача 4.



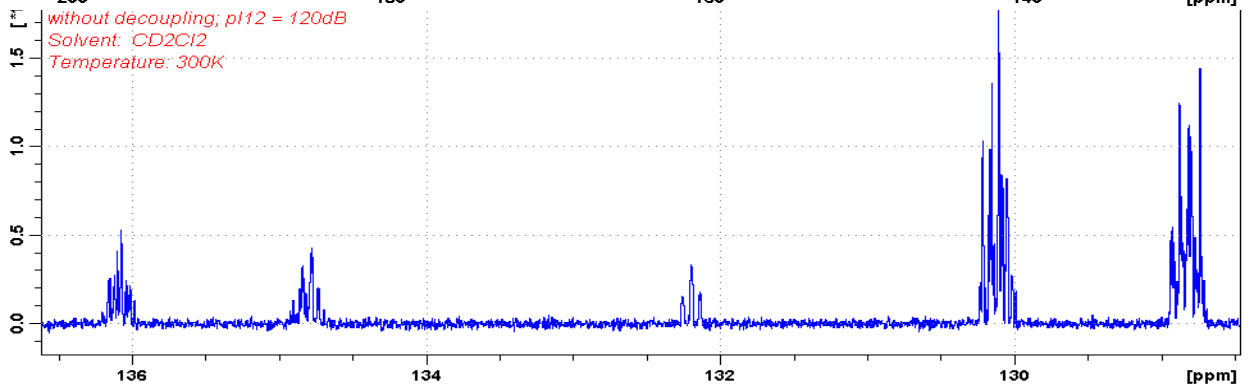
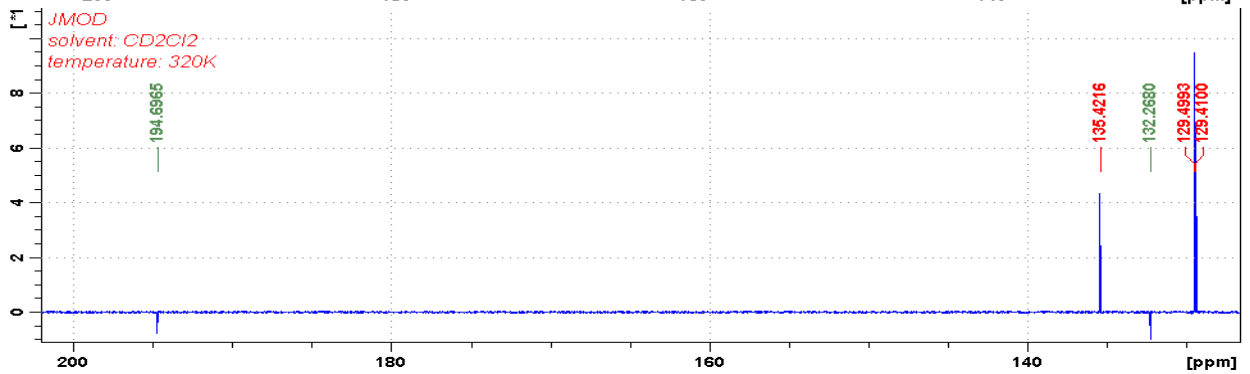
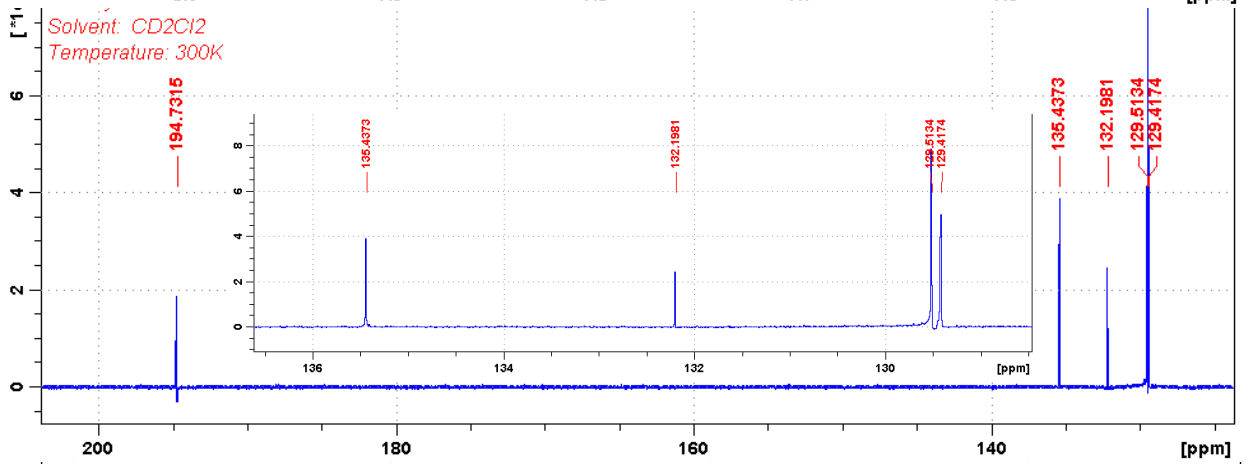
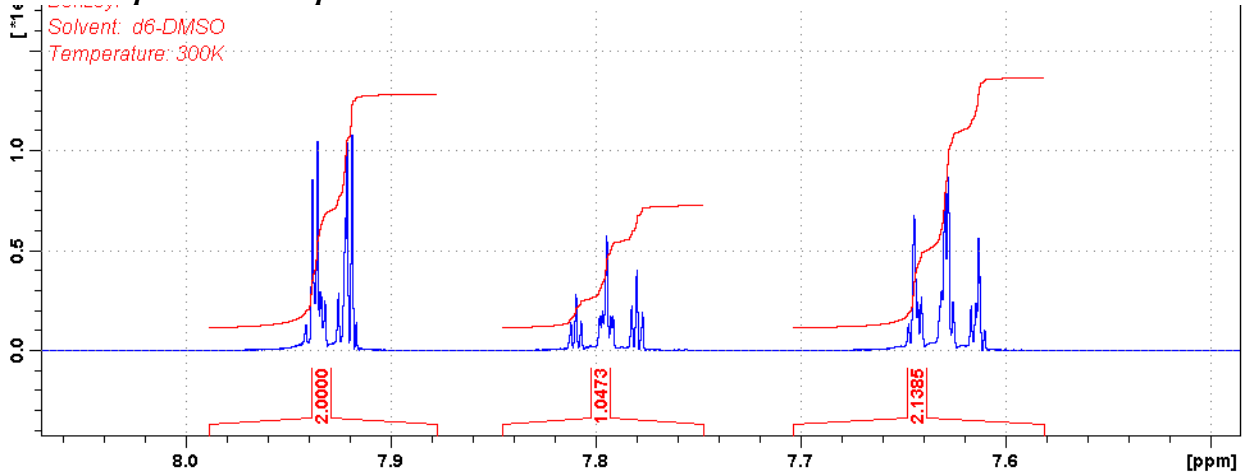
COSY.

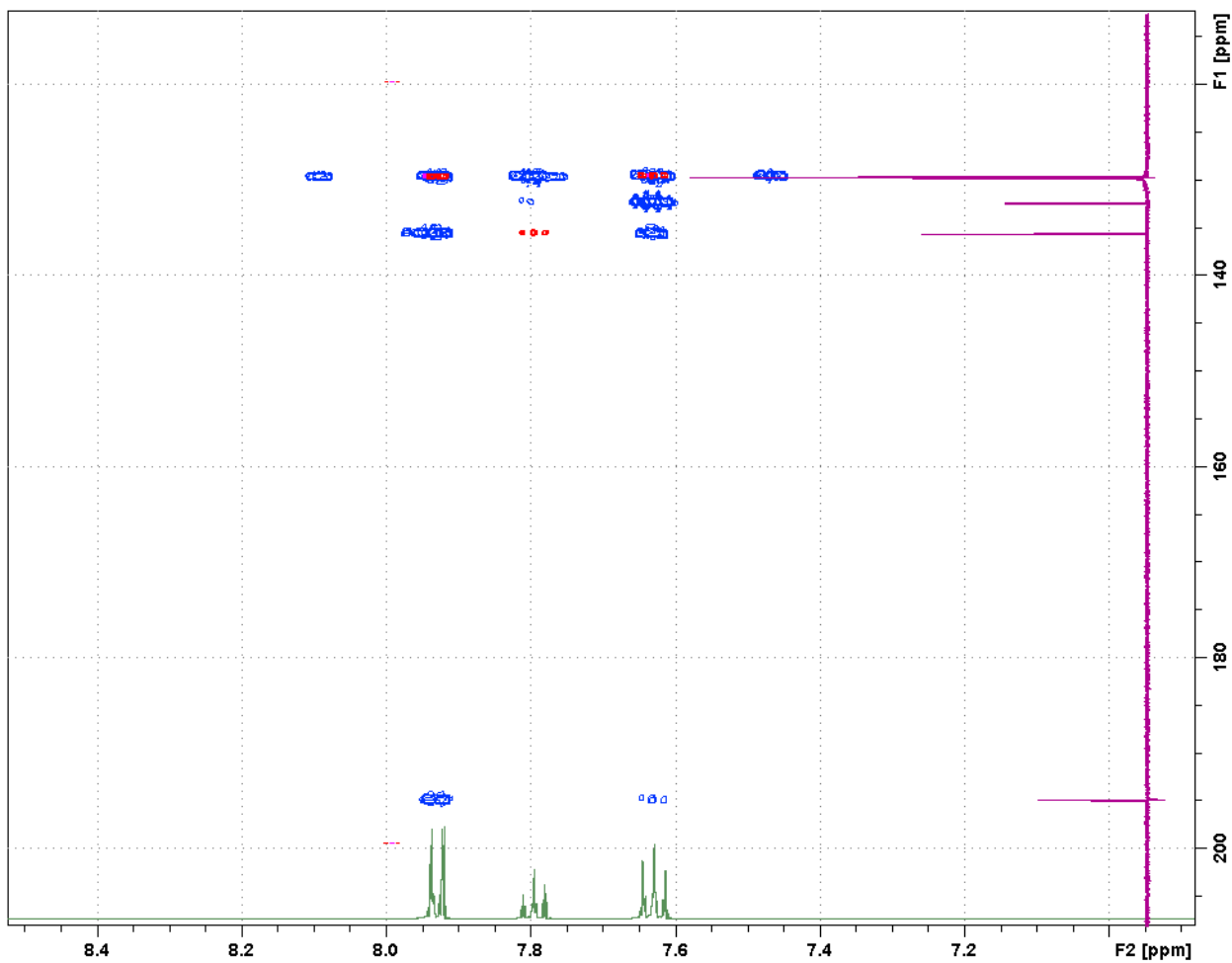


Синий – спектр HMBC (ближнее и дальнее CH-взаимодействие), красный – HSQC (прямое взаимодействие CH)

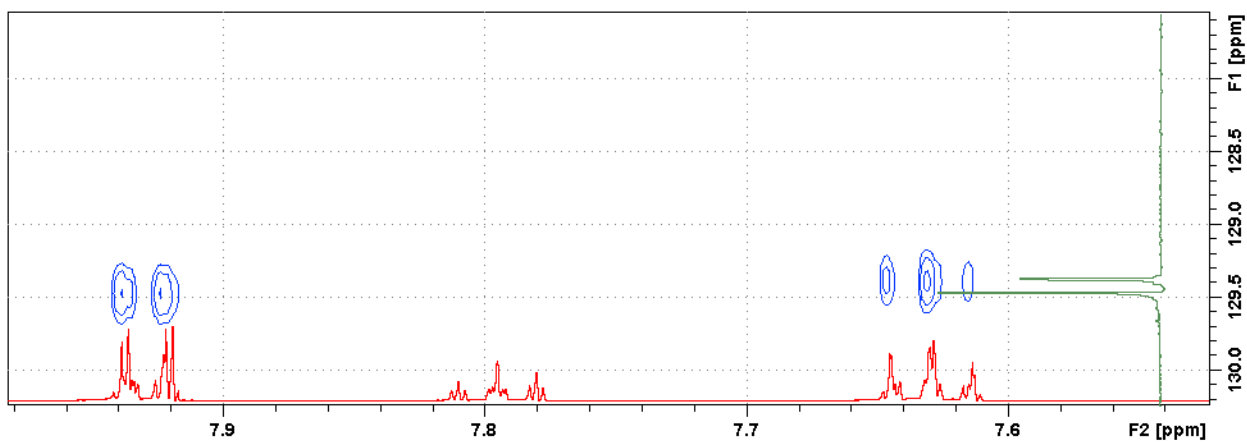
**Задача 5.**

**Определить строение соединения. Сделать полное отнесение сигналов.**



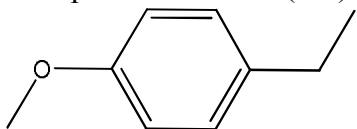


Синий – спектр HMBC (ближнее и дальнее СН-взаимодействие), красный – HSQC (прямое взаимодействие СН)



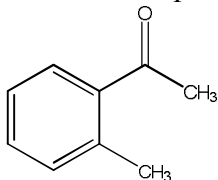
**Задача 6.**

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



**Задача 7.**

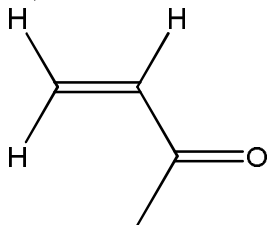
Изобразить спектр  $^1\text{H}$ - и  $^{13}\text{C}$  (JMOD) следующего соединения в метаноле.



**Задача 8.**

Изобразить спектр  $^1\text{H}$  следующего соединения. Указать мультиплетность сигналов.

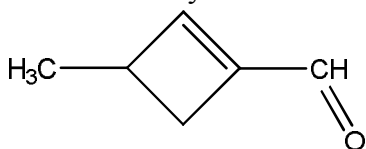
Оценить КССВ.



**Задача 9.**

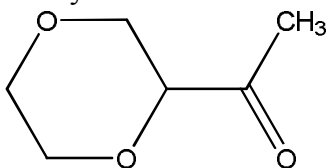
Изобразить спектр  $^1\text{H}$ - и  $^{13}\text{C}$  (JMOD) следующего соединения в хлороформе.

Указать мультиплетность.



**Задача 10.**

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



## 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### а) основная литература:

- Пентин Ю.А., Л.В. Вилков. Физические методы исследования в химии. М.: Мир, ООО «Издательство АСТ», 2003. – 683 с.
- Э. Дероум. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992.
- А. Гордон, Р. Форд. Спутник химика. М.: Мир, 1976.

### б) 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.
- Э. Преч, Ф. Бюльманн, К. Аффольтер. Определение строения органических соединений. М.: Мир, 2006.

### в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

- База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений. Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- 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](http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi)
- Программное обеспечение: Aldrich/ACD Library of FT NMR Spectra.
- Программное обеспечение: ACD/Labs со встроенным генератором спектров ЯМР.
- 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 2003.
- 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.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО с учетом рекомендаций ПООП ВПО по направлению «020100 ХИМИЯ», а также в соответствии с Образовательным стандартом высшего профессионального образования принятого в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования Новосибирский государственный университет.

Авторы: Ельцов Илья Владимирович, к.х.н., доцент кафедры общей химии ФЕН, доцент кафедры органической химии ФЕН.

Рецензент (ы) \_\_\_\_\_

Программа одобрена на заседании УМК ФЕН НГУ  
(Наименование уполномоченного органа вуза (УМК, НМС, Ученый совет))

от \_\_\_\_\_ года, протокол № \_\_\_\_\_