

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
"Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова"
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Зав. кафедрой фундаментальных проблем химии
химического факультета МГУ

академик _____ **О.М.Нефедов**
« ____ » _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
**«Основы спектроскопии
ядерного магнитного резонанса
и ее практического применения
в химических исследованиях»**

НАПРАВЛЕНИЕ ПОДГОТОВКИ 020100 «ХИМИЯ»

Специальность
«Химия»

Квалификация (степень) выпускника
магистр

Форма обучения очная

Москва
2014

Программа дисциплины **«Основы спектроскопии ядерного магнитного резонанса и ее практического применения в химических исследованиях»** составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО к структуре и результатам освоения основных образовательных программ специалитета по профессиональному циклу по направлению подготовки «Химия», а также задачами, стоящими перед Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова по реализации Программы развития МГУ. Программа составлена совместно Кафедрой фундаментальных проблем химии химического факультета МГУ им М.В.Ломоносова и Институтом органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН в рамках программы сотрудничества МГУ и РАН.

Учебная программа рассчитана на изучение курса в течение 1 семестра, 108 часов

автор и лектор – **к.х.н., с.н.с., доц. Ф.В.Тоукач** (Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН).

Английское название: **«Fundamentals and application of nuclear magnetic resonance spectroscopy in chemical research»**

1. Цели и задачи освоения дисциплины.

Цель освоения дисциплины – надстройка знаний, полученных в общем курсе органической химии, в направлении специализации в области специального органического синтеза, разработки новых методов синтеза практически важных веществ, методов направленного синтеза соединений с заданными свойствами.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

1. **Обязательная часть блока профессиональных дисциплин, дисциплина (модуль) "Спецкурсы и спецсеминары".**
2. Курс является логической надстройкой над базовыми курсами физической химии, теоретической неорганической химии, информатики и органической химии. От студента требуется понимание структуры вещества, основ механизмов реакций, дополняет фактографический материал новыми знаниями и, в конечном счете, помогает студентам в анализе продуктов синтеза и переходе на его следующую ступень – направленному синтезу практически важных неорганических, органических и элементоорганических соединений.

2.1. Курс основан на информации, полученной в базовых курсах 020100 (бакалавр) и 020201 (специалист):

«Органическая химия», «Теоретическая неорганическая химия» (вариативно для группы 109), «Основы общей и физической химии» (для группы 109), Информатика (базовый для 109 группы), части «Квантовая химия» курса «Физическая химия».

3.2. Курс необходим для проведения научных исследований при выполнении дипломной магистерской работы **по специализации «Фундаментальные проблемы химии».**

3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины:

3.1. Компетенции, необходимые для освоения дисциплины.

Специализированные компетенции:

Способность на основе фундаментальных химических знаний охватывать полную схему межпредметных и междисциплинарных взаимодействий при планировании и проведении научного эксперимента, на практике используя информационные и вычислительные технологии, современные методы и оборудование для синтеза и анализа (С-СПК-1);

способность к постановке и формулированию задач, а также планирования стратегии фундаментального научного исследования, в том числе направленного синтеза на основе прогнозируемых или заданных конечных результатов (С-СПК-2);

владение базовыми и специализированными навыками лабораторного химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами исследования механизмов химических превращений; получения и исследования химических веществ и материалов (С-СПК-3);

умение анализировать информацию при планировании эксперимента и обсуждении полученных результатов, включая аналитические и спектральные данные, в том числе с привлечением информационных баз данных; применять полученные в результате анализа данные для развития исследований, для докладов на конференциях, в научных публикациях (С-СПК-4).

3.2. Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины.

- способность к самостоятельному обучению и разработке новых методов исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля деятельности; к инновационной научно-образовательной деятельности (М-СК-3);
- владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии (в соответствии с темой выпускной квалификационной работы (магистерской диссертации)) (М-ПК-3);

3.3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины

В результате освоения дисциплины студент должен уметь анализировать возможные пути проведения реакции, анализировать принципиальную возможность проведения синтеза, планировать направленный органический синтез; иметь опыт деятельности по выполнению реальных научных задач в научной лаборатории, опыт по профессиональному описанию эксперимента в области органической химии.

Содержание и структура дисциплины.

Структура дисциплины:

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы (108 часов):

Вид работы	Всего час.
Общая трудоёмкость, акад. часов	108
Аудиторная работа:	54
Лекции, акад. часов	28
Семинары, акад. часов	12
Индивидуальная работа студентов под контролем преподавателя	6
Контрольные мероприятия	8
Самостоятельная работа	54
Вид итогового контроля (зачёт, зачёт с оценкой, экзамен)	Экзамен

4.2. Содержание разделов дисциплины

№ разд	Наименование раздела	Количество часов					Форма текущего контроля
		Всего	Аудиторная работа			Самостоятельная работа	
			Лекции	Семинары	Прочее		
1	Теоретические основы	39	14	6	6	19	ДЗ, РС
1	Практические аспекты	57	14	6	6	37	ДЗ, РС, РК, К

4.2.1. Лекции.

Распределение теоретического материала по лекциям

№ п/п	Тема лекции	Основные вопросы, рассматриваемые на лекции
1	2	3
1	Введение	Введение. Информационные ресурсы по теме ЯМР. Что и зачем изучается в рамках программы. 1.2 Применение ЯМР в органической химии, преимущества и недостатки метода. Основные характеристики одномерного спектра ЯМР. Количество, положение, форма и площадь сигналов. Простейшие примеры спектров.
2	Химический сдвиг	Причины возникновения явления ЯМР. Ядра в магнитном поле и их экранирование ядрами электронами и химическим окружением. Химический сдвиг, единицы измерения. Некоторые магнитно-активные ядра. Абсолютная и относительная чувствительность. Стандарты химических сдвигов. Химические сдвиги ^1H и ^{13}C . Зависимость от соседствующих атомов и связей, характерные значения.
3	Спиновое расщепление	Причины спин-спинового взаимодействия. Спиновое расщепление на нескольких одинаковых соседях. Треугольник Паскаля. Инвариантность дублета дублетов относительно последовательности рассмотрения расщепления. Другие примеры спинового расщепления. Случаи с тремя соседями. Вырождение дублета дублетов в триплет. Спиновое расщепление на ядрах со спином 1. Изотопный сдвиг. Спектр реального DMSO-d6.
4	Проявление спинового расщепления в	Основные протон-протонные КССВ. Спектры, снятые на спектрометрах с разной рабочей частотой. Спектры 1,2,4-дибромбензола и β -D-галактопиранозы. Примеры спинового расщепления: сигналы протонов

	спектрах - 1	замещенного бензола (простые случаи). Минорные линии в спектрах молекул с несколькими химически-эквивалентными ядрами.
5	Проявление спинового расщепления в спектрах - 2	Примеры спинового расщепления: сигналы протонов замещенного бензола (сложные случаи). Спектры молекул с плоскостью симметрии. Примеры спинового расщепления: изменения в спектрах при несовпадении КССВ между протонами в замещенном бензоле. Примеры спинового расщепления: теоретический спектр ^1H аллилбромиды.
6	Зависимость спектров от структуры - 1	Гетероядерное спин-спиновое взаимодействие. Сателлиты ^{13}C . Понятие широкополосной развязки. Результат, преимущества и недостатки эксперимента ЯМР ^{13}C Gated. Зависимость КССВ от гироманнитного отношения. Основные протон-углеродные КССВ. Зависимость от гибридизации. Знак КССВ. Эффект "крыши". Вырождение двух дублетов в синглет. Различные варианты проявления эффекта крыши в системе АВС. Примеры спектров. Алифатические и ароматические протоны. Перекрытие сигналов. Неидеальность формы линии, площади и эффекта крыши.
7	Зависимость спектров от структуры - 2	Спектры ЯМР смесей. Выявление подспектров компонентов смеси. Определение количественного состава смеси. Зависимость КССВ от структуры. Влияние валентного угла, π -электронов и заместителей на геминальные КССВ. Влияние торсионного угла и длин связей на вицинальные КССВ. Кривая Карплуса. Эффекты не первого порядка. Теоретические и расчетные спектры сильносвязанных систем. Обменные явления в ЯМР. Зависимость спектров ЯМР от температуры. Типичные барьеры распространенных обменных и конформационных процессов. Характеристическое время ЯМР. Сигналы подвижных протонов.
8	Импульсный ЯМР	Классический и импульсный ЯМР. Ограничения метода с непрерывной разверткой. Короткие и длинные импульсы. «Настройка колоколов». Преобразование Фурье. Схема простейшего эксперимента ЯМР. Накопление FID'a. Основные параметры одномерного эксперимента ЯМР. Естественное и цифровое разрешение. FID и спектр ЯМР. Экспоненциальный спад FID'a. Лоренцева форма линии. Данные в частотном и временном представлении. Действительная и мнимая части Фурье-образа.
9	Вектор макроскопической намагниченности	Магнитный момент ядра и вектор макроскопической намагниченности. Вращающаяся система координат. Влияние импульса на вектор макроскопической намагниченности. Виды импульсов. Воздействие импульса на образец. Непопадание линии в резонанс. Детектирование нескольких линий одновременно. Широкополосная развязка в спектрах ЯМР ^{13}C .
10	Двумерная спектроскопия	Двумерная корреляционная спектроскопия. Эксперимент COSY и его импульсная диаграмма. Двумерное преобразование Фурье. Примеры гомо- и гетероядерных спектров COSY. Информация, получаемая из этих экспериментов в структурных исследованиях. Отнесение протонного спектра по данным COSY. Селективное подавление спинового взаимодействия. Одномерные спектры двойного резонанса. Пример структурного исследования с помощью серии экспериментов двойного резонанса.
11	Ядерный эффект Оверхаузера	Ядерный эффект Оверхаузера. Зависимость знака и величины NOE от структуры. Применение спектроскопия ядерного эффекта Оверхаузера для выявления пространственных контактов протонов. Разностные эксперименты. Установление положения заместителей и отнесение протонного спектра с помощью разностной спектроскопии NOE.
12	Практические аспекты ЯМР	Операции с FID'ом до преобразования Фурье. Экспоненциальное и Гауссово умножение. Дополнение нулями, обрезание, аподизация. Аналоговый и цифровой сигналы. Оцифровка сигнала ЯМР. Усиление в

		канале приема. Принципиальная схема спектрометра ЯМР. Критерий Найквиста. Стабилизация условий резонанса в пространстве и во времени. Шиммирующие катушки. Дейтериевая стабилизация (LOCK). Критерии оценки разрешения.
13	ЯМР с точки зрения заказчика	Приготовление образца и выбор растворителя. Типичные ошибки. Распространенные в ЯМР растворители и их свойства. Распространенные программы для работы со спектрами ЯМР. Предсказание протонных спектров с помощью ACDLabs HNMR. Основные эксперименты ЯМР и получаемая из них информация. Схема структурного исследования с помощью спектроскопии ЯМР.

4.2.2. Дополнительные методические материалы к лекционному курсу:

<http://toukach.ru/rus/nmrslide.htm>, либо http://toukach.ru/files/nmr_slides.pdf

0. Название курса, ссылки на литературу и ресурсы в Internet
1. Применение ЯМР в органической химии + Что мы будем изучать?
2. Основные характеристики спектра ЯМР
3. Ядра в магнитном поле
4. Химические сдвиги ^1H
5. Некоторые магнитно-активные ядра
6. Химические сдвиги ^{13}C
7. Спин-спиновое взаимодействие
8. Другие примеры спинового расщепления
9. Спиновое расщепление на ядрах со спином 1
10. Эквивалентность атомов
11. Основные протон-протонные КССВ
12. Зависимость спектров от рабочей частоты спектрометра
13. Сигналы протонов замещенного бензола (простые случаи)
14. Сигналы протонов замещенного бензола (сложные случаи)
15. Сигналы протонов замещенного бензола (симметричное замещение)
16. Сигналы протонов замещенного бензола (несовпадение КССВ)
17. Теоретический спектр ^1H аллилбромида
18. Эффект крыши
19. Пример R#01 (^1H ЯМР)
20. Пример R#02 (^1H ЯМР)
21. Пример R#03 (^1H ЯМР)
22. Пример R#04 (^1H ЯМР)
23. Пример R#05 (^1H ЯМР)
24. Пример R#06 (^1H ЯМР)
25. Пример R#07 (^1H ЯМР)
26. Пример R#10 (^1H ЯМР смеси)
27. Пример R#12 (^1H ЯМР смеси)
28. Пример R#16 (неполное соответствие)
29. Гетероядерное спин-спиновое взаимодействие
30. Основные протон-углеродные КССВ
31. Квадрупольные ядра и сателлиты ^{13}C
32. Зависимость КССВ от структуры
33. Обменные явления в ЯМР
34. Процессы на шкале времени ЯМР
35. Спектры не первого порядка
36. Классический и импульсный ЯМР
37. FID и спектр ЯМР
38. Операции с FID до преобразования Фурье
39. Простейший эксперимент ЯМР
40. Оцифровка сигнала ЯМР

41. Аппаратура ЯМР в картинках
42. Основные понятия импульсного ЯМР
43. FID и фаза сигналов
44. Воздействие импульса на образец
45. Релаксация
46. Спиновое эхо
47. Перенос поляризации
48. Эксперимент COSY
49. Кросс-пики в двумерных корреляционных спектрах
50. Пример R#08 (1H и 13C ЯМР, HH COSY)
51. Пример R#09 (1H и 13C ЯМР, CH COSY)
52. Пример R#11 (1H ЯМР, HH COSY)
53. Пример R#11` (1H ЯМР, 13C сателлиты)
54. Пример R#26 (COSY сахарозы)
55. Пример R#26` (COSY сахарозы - отнесение)
56. Пример R#15 (1H ЯМР)
57. Пример R#15` (1H ЯМР, двойной резонанс)
58. Ядерный эффект Оверхаузера
59. Эксперименты NOESY и ROESY
60. Пример R#13 (1H NOE)
61. Пример R#14 (1H NOE)
62. Стабилизация условий резонанса
63. Приготовление образца и выбор растворителя
64. Растворители, используемые в ЯМР
65. Некорреляционные эксперименты ЯМР
66. Гомоядерные корреляции
67. Гетероядерные корреляции
68. Гомоядерные двумерные спектры модельного соединения (COSY, NOESY)
69. Гомоядерные двумерные спектры с переносом когерентности (COSY RCTn, TOCSY)
70. Гетероядерные двумерные спектры модельного соединения (HSQC, HSQC-TOCSY)
71. Пример R#26`` (TOCSY сахарозы)
72. Пример R#26``` (HSQC сахарозы)
73. Пример R#26```` (HMBC сахарозы)
74. Задание на установление структуры - одномерные спектры
75. Задание на установление структуры - COSY, HSQC
76. Решение задания на установление структуры - отнесение (COSY, HSQC)
77. Решение задания на установление структуры - установление замещения и последовательности
78. Предсказание спектров ЯМР

4.2.3. Семинарские и (или) лабораторные занятия

Семинарские занятия

№ п/п	Основные вопросы, рассматриваемые на занятии	Задания для самостоятельной работы	Активные и интерактивные формы проведения занятий
1	2	3	4
1	Предсказание формы сигналов в одномерных протонных спектрах. Рациональное решение задачи по соотнесению спектров со структурой. Ход рассуждений и возможные выводы.	Объяснить форму сигналов в спектре модельного соединения.	Обсуждение зависимости формы линии от структуры.
2	Тренировка в экспертной оценке соответствия структуре заявленной по одномерному протонному спектру. Отнесение одномерных протонных спектров на основании формы линии и измерения КССВ	Установить структуры 4-х модельных соединений по одномерному протонному спектру и брутто-формуле.	Обсуждение степени ненасыщенности, молекулярной симметрии, процесса установления структуры по спектру.
3	Классификация экспериментов ЯМР по типу получаемой информации. Рациональное решение задачи по соотнесению спектров со структурой по двумерным спектрам. Ход рассуждений, возможные выводы, планирование последовательности экспериментов.	Объяснить наличие, форму линии и интенсивность сигналов модельного соединения в спектрах COSY, NOESY, HSQC.	Обсуждение правил выбора эксперимента в зависимости от имеющейся структурной задачи и процесса отнесения двумерных спектров.
4	Тренировка в установлении неизвестных особенностей первичной структуры и конформации по набору разнородных спектров. Отнесение одномерных спектров на основании анализа двумерных гомо- и гетероядерных корреляций.	По набору двумерных спектров модельного соединения установить последовательность соединения остатков, позиции замещения, абсолютные конфигурации оптически активных центров.	Обсуждения влияния структурных характеристик биологически активных веществ на сигналы в одно- и двумерных спектрах ЯМР.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Таблица 5.1

Печатные учебно-методические материалы

№ п/п	Выходные данные (автор (ы), название, издательство, год издания)	Наличие (экз.)			
		Библиотека	Кафедра	Число студентов	Экз/студент
1	2	3	4	5	6
Основная учебная литература:					
1	Тоукач Ф.В. Спектроскопия ЯМР в органической химии. Альбом схем		4		
2	Тоукач Ф.В. Спектроскопия ЯМР в органической химии. Примеры спектров.		4		
3	Тоукач Ф.В. Вопросы и задания к курсу спектроскопии ЯМР в органической химии		4		
4	Тоукач Ф.В., Беляков П.А. Применение двумерной спектроскопии ЯМР в органической химии		4		
5	Э. Дероум «Современные методы спектроскопии ЯМР для химических исследований»		1		

Дополнительная литература профессионального образования:

1. А. Дероум "Современная спектроскопия ЯМР в химических исследованиях", М., Мир, 1992 (на русском языке)
2. Х. Гюнтер "Введение в курс спектроскопии ЯМР", М., Мир, 1984 (на русском языке)
3. К. Denk "NMR spectroscopy", University of Guelph, 2005 (на английском языке)
4. E. Becker "High resolution NMR: theory and chemical applications", Academic Press, 2000 (на английском языке)
5. J. Lambert, E. Mazzola "Nuclear magnetic resonance spectroscopy", Pearson Education Inc., 200x (на английском языке)
6. A. Rahman, M. Choudhary "Solving problems with NMR spectroscopy", Karachi, 200x (на английском языке)

Электронные учебно-методические материалы

№ п/п	Наименование учебно-методических материалов	Наличие			
		Электр. библиотека	Кафедра	Число студентов	Способ доступа
1	2	3	4	5	6
1	все вышеперечисленные в таблице 5.1			Неогр.	Web-сайт преподавателя http://toukach.ru/rus/
2	Тоукач Ф.В. Введение в импульсный ЯМР			Неогр.	Web-сайт преподавателя http://toukach.ru/rus/
3	Тоукач Ф.В. ЯМР в исследовании природных углеводов			Неогр.	Web-сайт преподавателя http://toukach.ru/rus/

6. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Таблица 4.1

Обеспечение дисциплины учебным оборудованием

№ п/ п	Наименование учебного оборудования	Наличие (кол-во)			
		Кафедра	Другие подразделения	Число студенто в	Время работы 1 студента, час/семестр
1	2	3	4	5	6
1	Компьютеры, имеющие выход в Интернет	16 шт.	0	16	10

Обеспечение дисциплины расходными материалами

Расходных материалов для освоения курса не требуется

7. Оценка качества усвоения учебного материала

7.1. Рубежные контрольные мероприятия (РКМ)

1. Четыре домашних задания по темам семинаров. Перечислены в колонке 3 таблицы «Семинарские занятия»
2. Контрольная работа, состоящая из двух задач на установление структуры по спектрам.
Задача 1: соотнести известную структуру соединения с одномерным протонным спектром и установить, соответствует ли спектр структуре.
Задача 2: установить характер связанности трех органических остатков с молекулярной массой около 200 по набору одно-и двумерных спектров: ^1H , ^1H с развязкой от фосфора, ^{13}C , COSY, ROESY, HSQC.
3. Контрольная работа по всему курсу в форме теста на время. Состоит из двух вариантов по 25 вопросов. Для каждого вопроса приведены несколько вариантов ответов. Необходимо отметить все правильные ответы и не отметить ни одного неправильного. Количество правильных ответов – от двух до семи на каждый вопрос.

4. Задания для самостоятельной/практической работы:

<http://toukach.ru/files/nmrtest.zip>

7.2. Экзамен

Проводится в устной форме.

Список вопросов для подготовки к экзамену:

Корреляция "структура – одномерный спектр"

1. Какая характеристика сигналов в спектре ЯМР соответствует количеству атомов, давших сигнал?
2. Какая характеристика сигналов в спектре ЯМР в наибольшей степени коррелирует с распределением электронной плотности по молекуле?
3. В чем чаще всего измеряются химические сдвиги?
4. В чем чаще всего измеряются константы спин-спинового взаимодействия?
5. Какие атомы называются "магнитно-эквивалентными"?
6. Каковы границы применимости треугольника Паскаля?
7. Какой сигнал должен дать протон с двумя одинаковыми соседями-протонами близко и одним далеко?
8. Какой сигнал должен дать протон с тремя одинаковыми соседями-протонами далеко и одним близко?
9. Как будет выглядеть сигнал протона в соединении $\text{H}_2\text{N-CO-CHD}_2$?
10. Как будет выглядеть сигнал выделенного протона в соединении $\text{Br}_2\text{HC-CHD-COOH}$?
11. Что такое изотопный сдвиг?
12. Какова должна быть форма сигналов протонов в 3-бромтолуоле, в предположении, что все мета-КССВ равны друг другу, и все орто-КССВ равны друг другу?
13. В каких случаях "крыша" сигналов системы из нескольких протонов получается более крутой?
14. Какие структурные особенности молекул приводят к спектрам не первого порядка?

Химические сдвиги и константы спин-спинового взаимодействия

1. Относительно чего измеряются химические сдвиги?
2. Как влияет гибридизация атома углерода на его химический сдвиг?
3. Как влияет электроотрицательность соседних атомов на химический сдвиг?
4. Каковы типичные значения химических сдвигов в ароматике?

5. Каковы характерные значения КССВ через разное число связей в бензольном кольце?
6. Каковы характерные значения геминальной КССВ в замещенном этилене?
7. Каковы характерные значения КССВ через три связи в алифатике?
8. Почему КССВ через 4 связи в алифатике наблюдаются редко, а в ароматике – часто?
9. Как изменится абсолютное значение геминальной КССВ с увеличением валентного угла центрального атома от 105° до 117° ?
10. Как изменяется величина вицинальной КССВ с увеличением торсионного угла между крайними связями от 0° до 180° ?
11. Как влияют электроотрицательные заместители на величины геминальных и вицинальных КССВ?
12. Как влияет длина средней связи на величину вицинальной КССВ?

Физические основы ЯМР

1. От чего зависит энергетическая разница между спиновыми состояниями ядер?
2. От чего зависит частота ядерного магнитного резонанса тех или иных ядер?
3. Какие значимые в химии природных соединений ядра являются магнитно-активными и имеют спин, равный $1/2$?
4. Каковы особенности спектроскопии ЯМР по квадрупольным ядрам?
5. Чем отличается абсолютная чувствительность ЯМР от относительной?
6. Спектры каких спиновых систем требуют для точного предсказания квантомеханического формализма?
7. Чем продольная релаксация отличается от поперечной?
8. Какой тип релаксации всегда происходит быстрее другого типа релаксации?
9. Как быстрая релаксация проявляет себя в спектрах?
10. Что является причиной появления сателлитов ^{13}C в протонном спектре?
11. Как можно повлиять на эффекты, привносимые в спектр квадрупольными ядрами?

Цифровая обработка данных ЯМР

1. Чем цифровой сигнал отличается от аналогового?
2. Что такое амплитуда, частота и фаза сигнала?
3. Как влияет на спектр ЯМР умножение FID на экспоненту?
4. Как влияет на спектр ЯМР умножение FID на функцию Гаусса?
5. В каких случаях применяется обрезание FID и аподизация?
6. Как можно получить FID из спектра ЯМР?
7. Как можно получить частотный спектр ЯМР из записанного во времени электромагнитного отклика на импульс?
8. Что такое цифровое разрешение?
9. Каковы основные особенности подхода NOSE применительно к предсказанию спектров ЯМР?
10. Каковы основные особенности нейронных сетей применительно к предсказанию спектров ЯМР?

Практическая реализация ЯМР

1. Как рабочая частота спектрометра влияет на вид спектров ЯМР?
2. В каком устройстве происходит облучение образца переменным электромагнитным полем?
3. В каком устройстве происходит считывание электромагнитного отклика образца на импульсное облучение?
4. От каких параметров накопления зависит отношение сигнал/шум?
5. Как связаны время накопления, ширина спектрального окна и число точек FID?
6. Какому критерию должна удовлетворять частота выборки для избежания отраженных сигналов?
7. Чем цифровое разрешение отличается от естественного?
8. Какое устройство позволяет снизить требования к АЦП в миллионы раз?
9. Как подавляются отраженные сигналы в спектрах ЯМР?
10. Зачем нужно квадратурное детектирование?
11. Каково назначение шиммирующих катушек?

12. Каково назначение системы LOCK?
13. Зачем нужно вращение образца вокруг оси Oz?
14. Какова типичная полуширина линии в рутинных экспериментах для образца в DMSO-d6?
15. Что такое фазовый цикл?

Образец для ЯМР

1. Какими преимуществами и недостатками обладает DMSO-d6 как растворитель для ЯМР?
2. Какими преимуществами и недостатками обладает CDCl₃ как растворитель для ЯМР?
3. О чем свидетельствует наличие градиента несимметричных искажений формы линии?
4. Каковы преимущества и недостатки 5-мм ампул по сравнению с 10 мм?
5. Как вязкость растворителя влияет на спектр ЯМР?
6. Сколько вещества нужно для получения спектра ¹³C за несколько часов?

Динамика

1. Почему сигналы –NH₂ и –ОН групп часто бывают уширены?
2. Что происходит со спектром ЯМР при нагревании образца, атомы которого неэквивалентны лишь с учетом конформации?
3. Что происходит со спектром ЯМР при добавлении воды в образец, имеющий подвижные протоны?
4. Каково характеристическое время ЯМР?
5. Что такое температура коалесценции?
6. Как с помощью ЯМР измерить барьер перехода между двумя состояниями молекулы?
7. Почему протонный спектр этанола не зависит от конформации?
8. Почему при подкислении этанола пропадает КССВ с гидроксильной группой?
9. Как посчитать усредненный химический сдвиг двух состояний протона?

Импульсный ЯМР

1. На какие параметры спектра ЯМР влияет длина импульса и каким образом?
2. Как длина импульса соотносится с его мощностью?
3. Зачем нужна задержка между импульсом и накоплением?
4. Зачем нужна задержка между сканами?
5. На какие параметры спектра ЯМР влияет скорость спадания FID и от чего она зависит?
6. От чего зависит скорость вращения используемой в импульсном ЯМР вращающейся системы координат?
7. От чего зависит угол поворота ВМН сразу после импульса во вращающейся системе координат?
8. Что происходит с заселенностью спиновых уровней при облучении образца 90°-импульсом?
9. Что происходит с вектором макроскопической намагниченности при облучении образца 180°-импульсом?
10. Каковы преимущества импульсного ЯМР перед ЯМР с непрерывной разверткой?
11. Какая функция приближенно описывает спадание огибающей FID?
12. Как называются осцилляции проекции ВМН на горизонтальную плоскость?
13. Расфокусировка каких компонент ВМН устраняется спиновым эхом?
14. Почему спиновое эхо не рефокусирует гетероядерные мультиплеты?
15. Какой части комплексного Фурье-образа соответствует сигнал поглощения?
16. Функцией какого типа описывается сигнал в резонансной катушке, вызванный вращающимся магнитным моментом?
17. Каковы обязательные атрибуты импульсной последовательности в корреляционных экспериментах?

Эксперименты ЯМР

1. К чему приводит широкополосная развязка от протонов в спектре ¹³C?
2. Зачем в эксперименте Gated включают развязку перед, но не во время накопления?

3. Какую информацию можно извлечь из спектров селективного двойного резонанса?
4. В каких условиях двойной резонанс лучше COSY?
5. Какую информацию можно извлечь из спектров COSY?
6. Какую дополнительную информацию (по сравнению с COSY) дают корреляционные эксперименты с переносом когерентности?
7. Какую информацию можно извлечь из спектров HSQC?
8. Какую информацию можно извлечь из спектров HMBC?
9. В каких условиях одномерный HMBC лучше двумерного?
10. Какую информацию можно извлечь из спектров TOCSY?
11. Какую информацию можно извлечь из спектров DOSY?
12. Из каких экспериментов можно извлечь гетероядерные KCCB?
13. В чем преимущества эксперимента INEPT перед SPI?
14. Чем отличаются спектры APT от спектров INEPT?
15. Какие существуют гетероядерные двумерные эксперименты с переносом когерентности?
16. Для ядер какого типа особенно эффективны эксперименты с переносом поляризации?

Ядерный эффект Оверхаузера

1. Какую информацию можно извлечь из спектров ROESY?
2. Какой тип релаксации приводит к появлению ЯЭО?
3. На каком межатомном расстоянии наблюдается ЯЭО?
4. Каково максимально возможное значение ядерного эффекта Оверхаузера?
5. Как ЯЭО зависит от частоты спектрометра?
6. Как соотносится фаза диагональных пиков и кросс-пиков ядерного эффекта Оверхаузера в спектрах ROESY?
7. Как соотносится фаза кросс-пиков химического обмена и кросс-пиков ядерного эффекта Оверхаузера в спектрах NOESY?
8. Почему наблюдение ЯЭО в одномерном варианте проводится в разностном режиме?