

Метод спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР) возник в конце 40-х годов XX

века и долгое время был предметом исследований преимущественно физиков. Только в 60-х годах метод ЯМР начал применяться в химии и вскоре занял одно из основных мест среди физико-химических методов анализа состава и строения веществ. В конце 70-х годов произошел значительный прорыв в спектроскопии в целом и в спектроскопии ЯМР в частности. Причиной этого явилось, во-первых, создание магнитов на основе сверхпроводников, а во-вторых, использование преобразования Фурье для анализа спектра. В результате в настоящее время спектроскопия ядерного магнитного резонанса превратилась из специфического мало востребованного предмета в широко используемый рабочий инструмент химика. Благодаря высокой чувствительности современных приборов, для исследования методом ЯМР доступны практически все элементы таблицы Менделеева. В приложении 1 в конце данного пособия приведен список изотопов элементов, обладающих ненулевым спином ядра. Соответственно все из них можно использовать для анализа соединений. Это делает ЯМР не только рабочим инструментом химика-органика, но позволяет использовать метод в различных областях химии: в катализе, неорганическом синтезе, исследовании твердых объектов (для этого используются специальные твердотельные ЯМР-спектрометры). Конечно, как и любой другой метод, спектроскопия ЯМР не является абсолютным инструментом. Для получения качественного спектра важны и содержание исследуемого изотопа, и его чувствительность (эти параметры так же приведены в прил. 1), и много других факторов. Но, тем не менее, не смотря на эти сложности, метод ЯМР на сегодняшний день занял прочное место среди физико-химических методов анализа и позволяет решать самые сложные научные задачи.



Как и в любом другом физическом методе исследования, для того, чтобы воспользоваться результатами спектроскопического анализа, необходимо научиться с ними обращаться: уметь обрабатывать и интерпретировать спектры и делать из результатов соответствующие выводы. По основам принципа ядерного магнитного и электронного парамагнитного резонанса существует большое количество учебников, книг и учебно-методических материалов [1-6], выпущенных и за рубежом, и у нас в стране, и даже в стенах нашего университета. Поэтому данное пособие не ориентировано на рассмотрение основ магнитного резонанса. Однако на сегодняшний

момент ощущается нехватка в материалах, помогающих начинающему химику научиться обрабатывать результаты эксперимента ЯМР. Именно эту цель поставили перед собой авторы данного пособия.

В настоящий момент существует достаточно большое количество программ для обработки спектров ЯМР, начиная от профессиональных, разрабатываемых, как правило, производителями спектрометров и служащих не только для обработки спектров, но и для управления самим спектрометром, и заканчивая достаточно простыми, но содержащими все необходимые инструменты для того, чтобы получить из спада свободной индукции (о нем мы расскажем немного ниже) спектр исследуемого соединения. Мы специально не называем второй класс программ любительскими, так как даже в этих программах требуется понимание того, что и как необходимо сделать. Именно этому и посвящено данное пособие.