

# ChemSpider

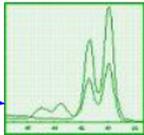
ChemSpider начал наполняться спектральной информацией сравнительно недавно, и пока что далеко не каждое соединение здесь охарактеризовано спектрами.

На странице, содержащей сведения о конкретном веществе, ЯМР-спектр может присутствовать в разделе **Spectra**, например:

**SPECTRA**

- Type: HNMR  
Associated Hyperlink: <http://rainier.chem.plu.edu/nutsform.html>  
Comments: These data are obtained from the Pacific Lutheran University FTNMR FID Archive  
Approved: No

При щелчке по стилизованному рисунку спектр выводится на экран в окошке апплета **JSpecView**.



Координаты курсора на графике

Если щелкнуть по полю апплета и открыть контекстное меню, можно увидеть много полезных функций



Кроме этого, на странице вещества в разделе **More / Data Sources** (закладка **Spectral Data**) приводятся ссылки на внешние спектральные ресурсы.

## Упражнение и контрольное задание.

Найдите в базе данных и выведите на экран Н-ЯМР-спектр **бромэтана**.  
(Подсказка. Код SMILES — самая простая форма конструирования запроса в этом случае).

Проанализируйте возможности апплета *JSpecView* для работы со спектром (смотрите контекстное меню).  
Что происходит, если при нажатой левой клавише мышки выделить участок спектра?

Спектр высокого разрешения бромэтана предъявите преподавателю.