

NMRShiftDB2

NMRShiftDB2 — это усовершенствованная версия известной ранее базы данных NMRShiftDB.

База данных содержит ^1H - и ^{13}C -ЯМР спектры.

База данных предназначена для решения двух задач:

- обнаружение спектра заданного вещества;
- идентификация вещества по известному спектру.

Запрос может быть:

- составлен на поисковом бланке;
- внесен в виде готового спектрального или структурного файла.

База данных имеет два бланка:

- основной;
- усложненный (*expert mode*).

При переходе с Главной страницы по ссылке *Search* по умолчанию открывается основной поисковый бланк, на котором можно сформулировать и текстовый, и структурный запрос.

Результаты поиска оформлены в виде двух фреймов:

- в левом фрейме приводятся структурные формулы обнаруженных веществ;
- в правом фрейме на закладке "Spectral Data" приводятся спектры, а на закладке "Additional Data" — сведения о веществе и о параметрах съемки спектра.

The screenshot displays the NMRShiftDB2 search interface. It is divided into two main sections, one for ^1H NMR and one for ^{13}C NMR.

Top Section (^1H NMR):

- Search Results:** Shows a search for a complete spectrum with a similarity measure of 99.97. The search type is set to ^1H .
- Structure Grid:** Displays several chemical structures with their similarity percentages: 99.97%, 99.92%, 99.82%, and 99.80%.
- Spectral Data Table:**

Atom No.	Mult. (coupling const.)	Meas. Shift	Input Shift	Diff. M-I
1-H		3.42 (H 4, H 5)	3.427	0.01,0.00,
2-H		1.70 (H 6, H 7, H 8)	1.679	0.02,0.00,0.00,
- Chemical Structure:** Shows a structure with a bromine atom (Br-3) and two protons (1 and 2).
- 1D Spectrum:** A plot of intensity vs. chemical shift (ppm) from 3.5 to 1.5. Two peaks are visible at approximately 3.4 and 1.7 ppm.
- Annotations:** A blue callout box labeled "Значения δ ." points to the peak positions in the spectrum. Another blue callout box labeled "Структурная формула и спектр" points to the chemical structure and spectrum.

Bottom Section (^{13}C NMR):

- Search Results:** Shows a search for a complete spectrum with a similarity measure of 58.2. The search type is set to ^{13}C .
- Spectral Data Table:**

Atom No.	Mult. (coupling const.)	Meas. Shift	Input Shift	Diff. M-I	expt-0 Speclib	expt-1 ocmainz inhouse-
1	T	27.5	1.679	25.82	27.63	27.9
2	Q	19.4	3.427	15.97	19.53	19.4
- Chemical Structure:** Shows a chemical structure with two carbon atoms (1 and 2).
- 1D Spectrum:** A plot of intensity vs. chemical shift (ppm) from 3.5 to 1.5. Two peaks are visible at approximately 27.5 and 19.4 ppm.

Упражнение.

Извлеките ЯМР-спектры бромэтана.
Тщательно рассмотрите структуру страницы результатов поиска.

Контрольное задание.

Извлеките ЯМР-спектр **бензоат-иона** и предъявите преподавателю.
(Совет: структурная формула — наиболее удобный вариант запроса).

По какой причине в приведенной ниже таблице отсутствуют данные для атомов №№ 5 и 7?

Atom No. ↓	Mult. (coupling const.)	Meas. Shift
3	S	136.84
4	D	129.46
6	D	127.62
8	D	130.10
9	S	170.33