

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



The detailed spectrum plot shows the x-axis labeled from 12,0 to -1,5 and the y-axis labeled 'ARBITRARY UNITS' from -800000 to 7200000. A peak at 1,5 ppm is highlighted with a red label '(1,5, 19512)'.

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.