



УДК 37.03  
МРНТИ 14.35.09  
DOI 10.37238/1680-0761.2022.88(4).135

Акатьев Н.В.\*

Западно-Казахстанский университет им. М.Утемисова,  
Уральск, Казахстан

\*Автор-корреспондент: niko\_aikidzin@mail.ru

E-mail: niko\_aikidzin@mail.ru

## РЕШЕНИЕ ОЛИМПИАДНЫХ ЗАДАЧ ПО ХИМИИ С АНАЛИЗОМ СПЕКТРОВ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

**Аннотация.** Задачи, включающие использование спектральных данных, встречаются всё чаще на химических олимпиадах различных уровней. Преимущественно, такие задачи присутствуют в заданиях Международной химической олимпиады (IChO), а также встречаются на Республиканских, студенческих олимпиадах и отборочных этапах. Алгоритм решения таких задач, при достаточной подготовке несложен и включает в себя стандартные для анализа ЯМР-спектров в рутинной лабораторной работе процедуры. Понимание теоретических основ ядерного магнитного резонанса и природы химического сдвига позволяют решать такие задачи без особого труда. Наличие же практического опыта использования ЯМР-спектроскопии в научно-исследовательской работе практически полностью исключает какие-либо сложности при их решении. В настоящей статье рассмотрены примеры решения задач, включающих анализ ЯМР-спектров с применением стандартных алгоритмов.

**Ключевые слова:** конкурсные задачи по химии; олимпиады по химии; олимпиадные задачи по химии; решение олимпиадных задач; ядерный магнитный резонанс; ЯМР-спектроскопия.

### *Введение*

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР, nuclear magnetic resonance, NMR) является одним из самых информативных методов исследования структуры и динамических превращений молекул. Высокая информативность спектров, простота приготовления образцов и быстрота исследования сделали этот вид спектроскопии одним из наиболее важных экспресс-методов анализа органических соединений [1-3]. Метод также эффективно позволяет исследовать и неорганические соединения [4].

Поскольку ядерный магнетизм явление весьма сложное, для его описания привлекается не менее сложный математический аппарат квантовой механики. Однако понять, что из себя представляет явление ЯМР не трудно. Атомное ядро расположено в центре электронного облака и находящиеся неподалеку акцепторные и донорные группы могут изменять электронную плотность вокруг ядра за счёт проявления индуктивного или мезомерного эффекта. Это незначительное изменение, составляющее несколько миллионных долей от индукции основного магнитного поля, предоставляет детальную информацию о структуре молекулы. Такое изменение называют *химическим сдвигом* ( $\delta$ ). Различные ядра, входящие в состав одной молекулы, могут быть идентифицированы по их химическим сдвигам. Спектр ЯМР по своей сути представляет собой график зависимости интенсивности поглощения радиочастотного излучения от его частоты. В качестве стандарта в ЯМР-спектроскопии используют тетраметилсилан (( $\text{CH}_3$ )<sub>4</sub>Si, ТМС), химический сдвиг сигнала которого в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  и  $^{29}\text{Si}$  принимают за ноль.

Ядерный магнитный резонанс можно наблюдать только для ядер с ненулевым спиновым квантовым числом. Все ядра с нечетными массовыми числами, а также ядра, имеющие нечетное число протонов и нейтронов, обладают магнитным моментом ( $I \neq 0$ ). В первом случае  $I$  принимает полуцелые значения ( $1/2, 3/2, 5/2 \dots$ ), во втором - целые ( $1, 2, 3 \dots$ ). Из практически важных ядер, спиновое число  $1/2$  имеют:  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{15}\text{N}$ . Для них возможны 2 спиновых состояния ( $+1/2$  и  $-1/2$ ). Строго говоря, сигналы в спектрах ЯМР могут давать только ядра атомов, обладающих нечетным спиновым числом. Подавляющее большинство спектров регистрируется на ядрах  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ . Наиболее распространенные изотопы углерода  $^{12}\text{C}$ , кислорода  $^{16}\text{O}$  и многие другие, например, дейтерий, являясь немагнитными, не регистрируются в ЯМР-спектрах.

Естественно, что для решения задач, содержащих данные ЯМР-спектроскопии, необходимо иметь как минимум базовые теоретические представления о методе ЯМР, магнитных свойствах атомных ядер и о том, какую информацию может предоставлять ЯМР-спектр на основании химических сдвигов, для чего рекомендуется соответствующая литература [5-8].

На рисунке 1 представлена шкала химических сдвигов в спектрах  $^1\text{H}$  ЯМР. Наличие кратных связей, ароматической структуры или сильно электроотрицательных атомов (например, кислорода) приводит к сдвигу сигналов в более слабые поля за счет уменьшения экранирования атомных ядер из-за смещения электронной плотности к более электроотрицательным атомам или атомным группам [9].

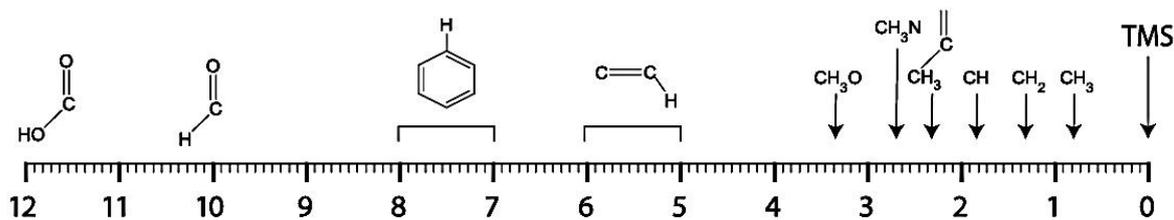


Рисунок 1 - Шкала химических сдвигов в спектрах протонного магнитного резонанса

Основные характеристики ЯМР-спектров и получаемая из них информация включают в себя:

1. Количество сигналов (пиков) – количество групп магнитно-неэквивалентных ядер,
2. Интегральная интенсивность пиков (площадь сигнала резонанса) – количество эквивалентных ядер в составе каждой группы.
3. Положение пиков на шкале химического сдвига – распределение электронной плотности в молекуле, информация о химическом окружении,
4. Мультиплетность (форма) сигналов (тонкая структура мультиплета) – тип и количество соседних ядер.

Сигналы в спектре могут быть представлены в виде одиночной линии или в виде групп линий, что наиболее характерно для протонных спектров (Рис. 2).

Так же характеристикой сигнала ЯМР-спектра служит константа спин-спинового взаимодействия (КССВ), которая позволяет сделать вывод о торсионных углах в молекуле. Некоторые динамические процессы также могут дополнительно влиять на форму спектра и повышать его информативность. Например, при регистрации спектра раствора этанола в тяжелой воде ( $\text{D}_2\text{O}$ ) быстрый обмен протона гидроксильной группы на дейтерий приводит к тому, что в спектре не будет наблюдаться сигнала гидроксильной группы [10].

Для записи ЯМР-спектров исследуемое вещество растворяют в дейтерированных растворителях ( $\text{D}_2\text{O}$ ,  $\text{CDCl}_3$ ,  $\text{CD}_3\text{OD}$ ,  $\text{DMSO-d}_6$  и т.д.). Однако, они всегда содержат микропримеси недеийтерированных молекул, которые в протонных ЯМР-спектрах дают остаточные сигналы. Величины химических сдвигов и мультиплетность остаточных

сигналов важнейших растворителей приведены в работе [11]. Эти данные необходимо знать, чтобы не принять остаточный сигнал растворителя за сигнал исследуемого вещества.

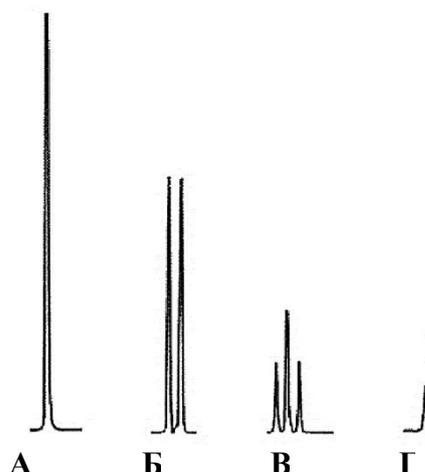
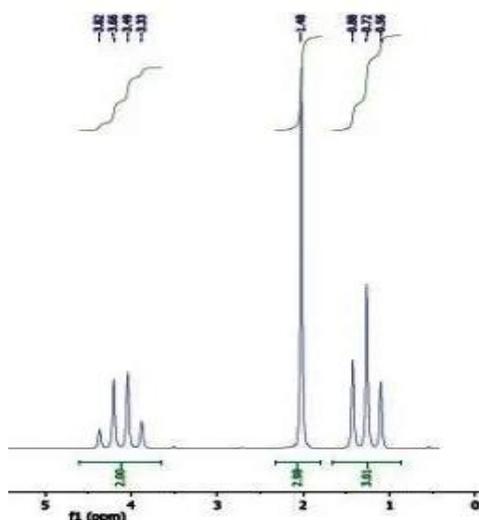


Рисунок 2 - Сигналы  $^1\text{H}$  ЯМР: А – синглет (s); Б – дублет (d); В – триплет (t), Г – квадруплет (q)

Задачи, подразумевающие использование спектральных характеристик вещества, могут включать в себя:

1. идентификация вещества по спектру,
2. предсказание спектра вещества,
3. установление соответствия между формулами веществ и спектрами.

Спектры в таких задачах могут быть представлены в виде непосредственно спектра (диаграммы) или в виде линейной записи. Запись на примере  $^1\text{H}$  ЯМР-спектра этилацетата представлены на рисунке 3.



$\delta(90\text{MHz, CDCl}_3)$  1.26 (t,3H), 2.04 (s,3H), 4.12 (q,2H)

Рисунок 3 -  $^1\text{H}$  ЯМР-спектр этилацетата  $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$ : А-диаграмма, Б-линейная запись

*Материалы и методы исследования.*

Материалами для исследования выбраны олимпиадные задачи, включающие в себя анализ спектров ядерного магнитного резонанса. Задачи относятся к двум типам: сопоставление спектров и формул органических веществ и установление строения неорганического вещества по спектральным данным. Методы включают алгоритмы анализа одномерных ЯМР-спектров, описанный в литературе, а также личный опыт автора.

*Результаты исследования.*

Для примера рассмотрим порядок решения задачи в которой предлагается установить соответствие между структурой соединений и их ЯМР-спектрами (спектры заимствованы из литературы [12]).

**Задача 1.**

Для нижеследующих соединений А-Г установите соответствие между структурой и  $^1\text{H}$  ЯМР-спектрами.

**А**

**Б**

**В**

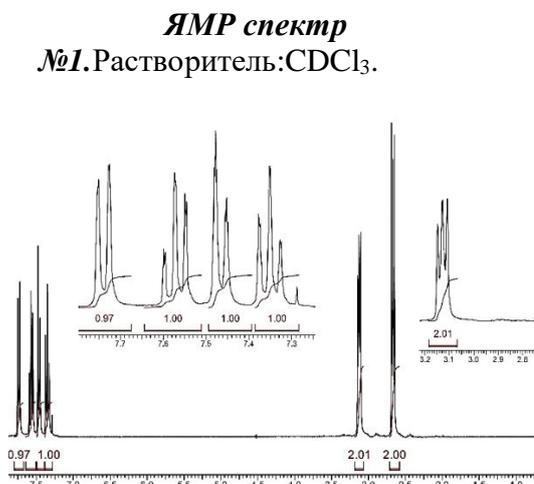
**Г**

Н-этиланилин

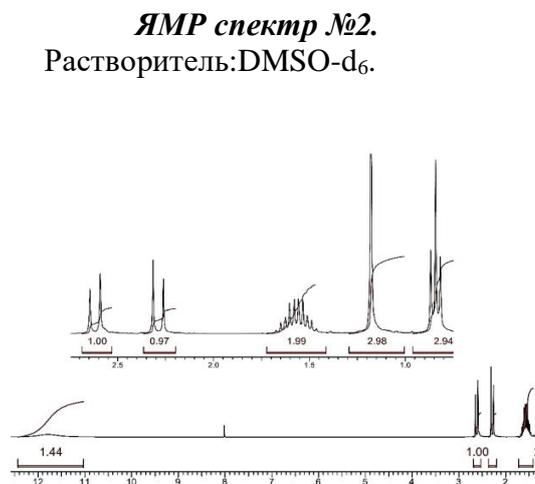
2,3-дигидро-  
1H-инденон-1

Метилэт  
илкетон

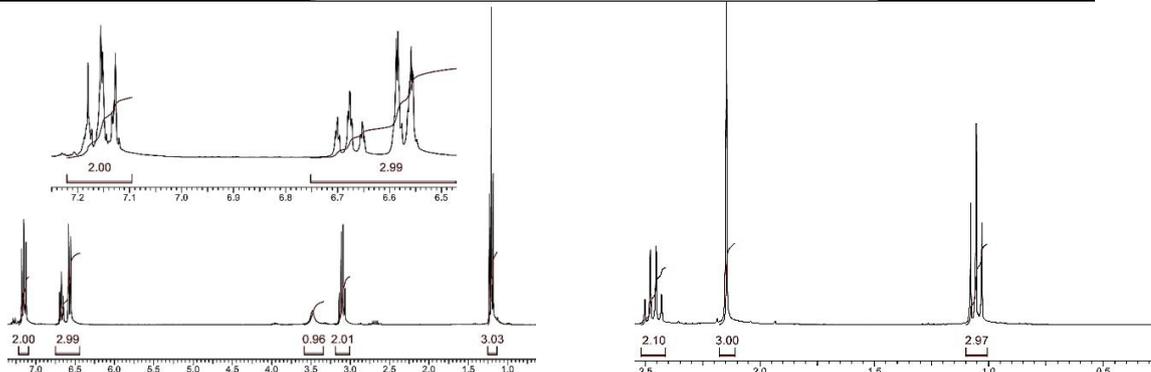
2-этил-2-  
метилянтарная кислота



**ЯМР спектр №3.** Растворитель:  $\text{CDCl}_3$ .



**ЯМР спектр №4.** Растворитель:  $\text{CDCl}_3$ .



### Решение.

Как видно, соединения **А** и **Б** имеют в своей структуре бензольное кольцо. В соединениях **В** и **Г** ароматических структурных фрагментов нет, и они принадлежат к алифатическому ряду.

Попарное сравнение структур **А-Б** и **В-Г** приводит к следующим выводам.

1. Соединению **А** должен соответствовать спектр №3 т.к. он содержит набор из трёх сигналов, соответствующих пяти ароматическим протонам в соотношении 1:2:2 и два сигнала соответствующие пяти алифатическим протонам с соотношением 2:3. Так же в данном спектре присутствует сигнал  $\approx 3,5$  ppm в виде небольшого уширенного синглета с интегральной интенсивностью 1, что соответствует протону аминогруппы.

2. Для соединения **Б** в спектре должны присутствовать четыре сигнала соответствующие четырём ароматическим протонам в соотношении 1:1:1:1 и два сигнала соответствующие четырём алифатическим протонам с соотношением интегральных интенсивностей 1:1. Такие соотношения наблюдаются в спектре №1. Два сигнала соответствующие протонам двух  $-\text{CH}_2-$  групп пятичленного циклического структурного фрагмента и четыре сигнала соответствующие ароматическим протонам указывают на то, что данный спектр принадлежит соединению **Б**.

3. Соединению **В** соответствует спектр №4. Положение сигналов по шкале химического сдвига говорит о том, что данное соединение не содержит ароматических структурных фрагментов и чётко указывает на принадлежность соединения к алифатическому ряду. Количество пиков говорит о трёх типах неэквивалентных протонов в структуре соединения. Интегральная интенсивность, соответствующая соотношению 2:3:3 и их мультиплетность, абсолютно точно позволяет соотнести данный спектр со структурой **В**. Триплет при 1,05 ppm принадлежит метильной группе этильного фрагмента. Синглет при 2,30 ppm соответствует второй метильной группе, соединенной с С-О-группой, а квадруплет при 2,46 ppm принадлежит  $-\text{CH}_2-$  группе этильного фрагмента.

4. Соединению **Г** соответствует спектр №2 т.к. в нем отсутствуют сигналы ароматических протонов, лежащие в диапазоне 6,5-8,5 ppm. Также в представленном спектре имеется набор характерных сигналов, соответствующих двум метильным группам: мультиплет соответствующий  $-\text{CH}_2-$  группе в структурном фрагменте  $-\text{CH}_2\text{COOH}$  и сигналы, соответствующие протонам второй  $-\text{CH}_2-$  группы в структуре  $\text{CH}_3-\text{CH}_2-$ . Дополняет информацию наличие сильно уширенного синглета  $\approx 12$  ppm, соответствующего протонам карбоксильных групп.

Исходя из вышеизложенного можно заключить, что спектр №1 принадлежит соединению **Б**, а спектр №3 – соединению **А**.

В итоге правильное соотнесение структур и спектров соответствует **А - №3, Б - №1, В - №4 и Г - №2**.

В качестве примера задачи на установление структуры неорганического соединения по спектру ЯМР рассмотрим задачу из книги [13].

**Задача 2.**

Спектр  $^{19}\text{F}$  ЯМР пентафторида сурьмы при  $0^\circ\text{C}$  состоит из трёх линий с соотношением 1:2:2 (Рис.4), а при температуре  $25^\circ\text{C}$  линии сливаются в один сигнал. Предположите структуру пентафторида сурьмы при пониженной температуре.

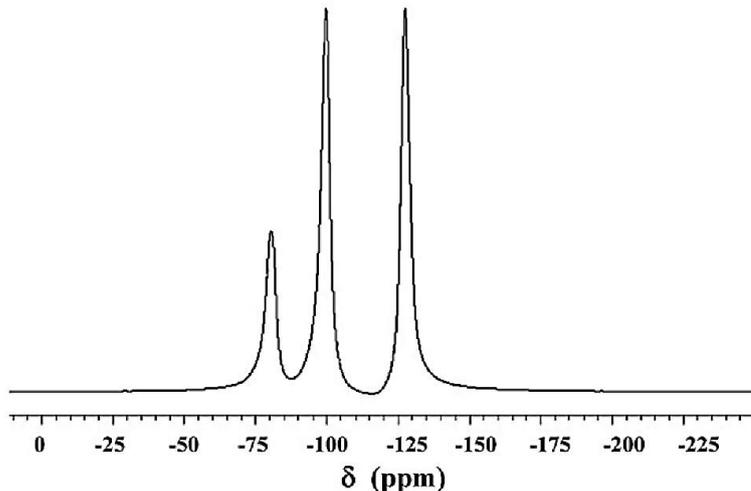


Рисунок 4 -  $^{19}\text{F}$  ЯМР-спектр пентафторида сурьмы при  $0^\circ\text{C}$  ( $\delta(\text{ppm})$  -83.7, -102.9, -130.5)

**Решение.**

Количество пиков равное трём означает, что вещество содержит три типа неэквивалентных атомов фтора. Поскольку в пентафториде сурьмы только два вида атомов (сурьма и фтор), то можно утверждать, что при  $25^\circ\text{C}$  это вещество является мономером т.к. один единственный сигнал  $^{19}\text{F}$  ЯМР говорит об эквивалентности всех пяти атомов фтора. Наиболее вероятная в таких случаях структура тригональная бипирамида в которой все Sb-F-связи равноценны.

Расщепление спектра на три синглета при понижении температуры говорит об изменении химического окружения вокруг соответствующих ядер, что в данном случае возможно лишь при взаимодействии молекул  $\text{SbF}_5$  между собой. В этом случае могут образоваться только  $n$ -мерные структуры  $(\text{SbF}_5)_n$ . Соотношение площади пиков (интегральная интенсивность), согласно условию задачи, равно 1:2:2, что позволят предположить наиболее вероятную структуру для  $(\text{SbF}_5)_n$ . Понятно, что атом сурьмы должны окружать три типа химически не эквивалентных атомов фтора. Чтобы удовлетворить условиям задачи, следует предположить, что в жидком  $\text{SbF}_5$ , при  $0^\circ\text{C}$  имеет место полимеризация, обусловленная образованием полимерных цепочек из  $\text{SbF}_6$ -октаэдров. Один из атомов фтора при этом должен выполнять роль мостикового лиганда, за счет чего в структуре вещества атомы фтора становятся не эквивалентными (Рис. 5).

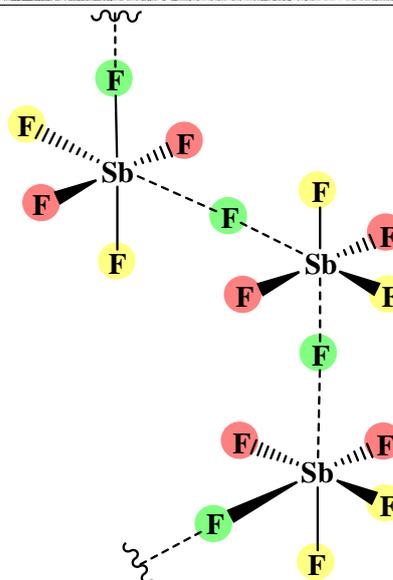
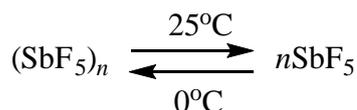


Рисунок 5 - Наиболее вероятная структура пентафторида сурьмы удовлетворяющая условию задачи (эквивалентные атомы показаны одинаковым цветом)

Такая структура соответствует литературным данным [14]. Соответственно, в жидком пентафториде сурьмы при изменении температуры имеет место деполимеризация с образованием мономера:



Так же условию задачи удовлетворяет формула  $[\text{SbF}_4]^+[\text{SbF}_6]^-$ . В этом случае в катионе, который будет представлять собой плоский квадрат, все четыре атома фтора будут эквивалентны (Рис.6).

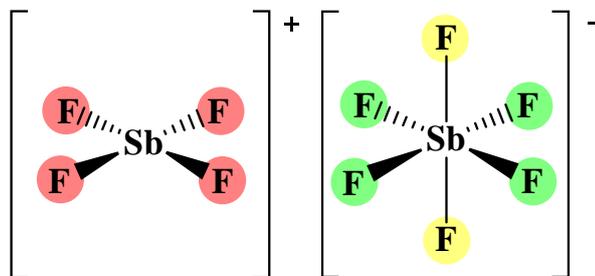


Рисунок 6 – Предполагаемая структура пентафторида сурьмы в виде противоионов (эквивалентные атомы показаны одинаковым цветом)

Анион же должен в таком случае представлять собой октаэдр, в котором два апикальных и четыре угловых атома фтора образуют две другие группы магнитно-эквивалентных атомов. Соотношение площадей пиков при этом так же составит 1:2:2.

#### Заключение.

Анализ ЯМР-спектров на уровне олимпиадных задач не представляет большой сложности при должной теоретической подготовке. В отличие от научно-исследовательской работы они одномерны и не слишком сложны. Для задач преимущественно подбирают спектры чистых веществ, смесей известного состава или состав которых можно легко предсказать и корректно интерпретировать положение сигналов и их мультиплетность. В



случае же более сложных спектров задания скорее всего будут снабжены дополнительными данными о возможном составе и структуре вещества, или смеси, наличии примесей, динамических процессов, данными других спектральных методов (Масс-, ИК-, КР-, УФ-), элементного анализа и т.д. Помощь по анализу ЯМР-спектров окажется необходимой справочная литература [15-17]. При наличии же у участника олимпиады опыта использования ЯМР-спектроскопии в научно-исследовательской работе, решение таких задач проблематичным не будет.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований: Пер. с англ.- М.: Мир, 1992. - 403 с.
- [2] Ионин Б.И., Ершов Б.А., Кольцов А.И. ЯМР-спектроскопия в органической химии/Под ред. Б.А.Ершова – 2-е изд., перераб. – Л.: Химия, 1983. – 272 с.
- [3] Сергеев Н.М. Спектроскопия ЯМР (для химиков - органиков). М., Изд-во Моск. Ун-та, 1981. - 279с.
- [4] Маров И.Н., Костромина Н.А. ЭПР и ЯМР в химии координационных соединений: М.- Наука. 1979. – 267 с.
- [5] Roger S. Macomber A complete introduction to modern NMR spectroscopy John Wiley & Sons Inc. 1998.
- [6] Лундин А.Г., Федин Э.И. ЯМР-спектроскопия. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986. - 224 с.
- [7] Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР- спектроскопии в органической химии М.: Высшая школа, 1971. -132 с.
- [8] James Keeler Understanding NMR spectroscopy John Wiley & Sons Inc. 2005. P.211
- [9] Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях: Пер. с англ. – М.: Мир, 1990. – 711 с.
- [10] Н. Friebolin, J. K. Beconsall Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy John Wiley VCH. 2022. p. 947.
- [11] G.R.Fulmer, A.J.M.Miller, N.H.Sherden, H.E.Gottlieb, A.Nudelman, B.M.Stoltz, J.E.Bercaw, K.I.Goldberg NMR Chemical Shifts of Trace Impurities: Common Laboratory Solvents, Organics, and Gases in Deuterated Solvents Relevant to the Organometallic Chemist *Organometallics* **2010**, 29, 2176–2179.
- [12] Нифантьев И.Э., Ивченко П.В. Практический курс спектроскопии ядерного магнитного резонанса: Изд-во МГУ, 2006. – 200 с.
- [13] Лисицын А.З., Зейфман А.А. Очень нестандартные задачи по химии/Под ред. В.В.Ерёмина. - М.:МЦНМО, 2015.-192 с.
- [14] A.Bock, M.Dubois, P.Bonnet, A.Hamwi, D.Avignat, L.Moch, B.Morel Investigation of the purity of antimony pentafluoride using <sup>19</sup>F NMR *Journal of Fluorine Chemistry* 134 (2012) 24–28.
- [15] E.Breitmaier Structure elucidation by NMR in organic chemistry: A practical guide John Wiley & Sons Inc. 2002.
- [16] Преч Э. Определение строения органических соединений. Таблицы спектральных данных. / Э.Преч, Ф.Бюльманн, К. Аффольтер. - Пер. с англ. - М.: Мир; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006.- 438 с.
- [17] R.M.Silverstein, F.X.Webster, D.J.Kiemle Spectrometric identification of organic compounds John Wiley & Sons Inc. 2005.



## REFERENCES

- [1] Deroum E. *Sovremennyye metody YaMR dlya himicheskikh issledovaniy* [Modern NMR methods for chemical investigations] -Moscow.: Mir, 1992. – p. 403 [in Russian].
- [2] Yonin B.I., Yershov B.A., Kol'tsov A.I. *YaMR-spectroscopiya v organicheskoy khimii* [NMR-spectroscopy in organic chemistry] *Chimiya*, 1983. – p. 272 [in Russian].
- [3] Sergeev N.M. *Spectroscopiya YaMR (dlyachimikov-organikov)* [NMR-spectroscopy for organic chemists]. Moscow, Izdatel'stvo Moskovskogo Universiteta, 1981. – p. 279 [in Russian].
- [4] Marov I.N., Kostromina N.A. *EPR i YaMR v khimii koordinatsionnykh soedineniy* [EPR and NMR in chemistry of coordination compounds] Moscow.-Nauka. 1979. – p. 267 [in Russian].
- [5] Roger S. Macomber *A complete introduction to modern NMR spectroscopy* John Wiley&Sons Inc. 1998. [in English].
- [6] Lundin A.G., Fedin E.I. *YaMR-spectroscopiya* [NMR-spectroscopy] Moscow.: Nauka, 1986. – p. 224 [in Russian].
- [7] Kazitsina L.A., Kupletskaya N.B. *Primeneniye UF-, IK-i YaMR spektroskopii v organicheskoy khimii* [Using of UV-, IR- and NMR-spectroscopy in organic chemistry] Moscow.: Vysshaya shkola, 1971. – p. 132. [in Russian].
- [8] James Keeler *Understanding NMR spectroscopy* John Wiley & Sons Inc. 2005. P. 211 [in English].
- [9] Ernst R., Bodenhausen J., Vokaun A. *YaMR v odnom i dvukh izmereniyakh* [NMR in one and two dimensions] Mir, 1990. – p. 711 [in Russian].
- [10] H. Friebolin, J.K. Becconsall *Basic One - and Two-Dimensional NMR Spectroscopy* John Wiley VCH. 2022. p. 947 [in English].
- [11] G.R.Fulmer, A.J.M.Miller, N.H.Sherden, H.E.Gottlieb, A.Nudelman, B.M. Stoltz, J.E.Bercaw, K.I.Goldberg *NMR Chemical Shifts of Trace Impurities: Common Laboratory Solvents, Organics, and Gases in Deuterated Solvents Relevant to the Organometallic Chemist* *Organometallics* **2010**, 29, 2176–2179 [inEnglish].
- [12] Nifantsev I.E., Ivchenko P.V. *Practicheskii kurs spektroskopii dergnogo magnitnogo rezonansa* [Practical course on nuclear magnetic resonance spectroscopy] Indatel'stvo MGU, 2006. – p. 200 [in Russian].
- [13] Lisitsin A.Z., Zeifman A.A. *Ochen' nestandartniye zadachi po khimii* [Very non-standard tasks in chemistry] MCNMO, 2015. – p. 192 [in Russian].
- [14] A.Bock, M.Dubois, P.Bonnet, A.Hamwi, D.Avignat, L.Moch, B.Morel *Investigation of the purity of antimony pentafluoride using <sup>19</sup>F NMR* *Journal of Fluorine Chemistry* 134 (2012) 24–28. [in English].
- [15] E.Breitmaier *Structure elucidation by NMR in organic chemistry: A practical guide* John Wiley & Sons Inc. 2002. [in English].
- [16] Prech E. *Opredeleniye stroeniya organicheskikh soedineniy. Tablitsy spectralnich dannyykh* [Determination of the structure of organic compounds. Tables of spectral data.] BINOM. Laboratoriya znaniy, 2006. – p. 438 [inRussian].
- [17] R.M.Silverstein, F.X.Webster, D.J.Kiemle *Spectrometric identification of organic compounds* John Wiley & Sons Inc. 2005. [in English].



Акатьев Н.В.

**ЯДРОЛЫҚ МАГНИТТІК РЕЗОНАНС СПЕКТРЛЕРІН ТАЛДАЙ ОТЫРЫП  
ХИМИЯ БОЙЫНША ОЛИМПИАДАЛЫҚ ЕСЕПТЕРДІ ШЕШУ**

**Аңдатпа.** Спектрлік деректер қамтылған әртүрлі деңгейдегі есептер химиялық олимпиадаларда жиі кездеседі. Көбінесе, мұндай есептер Халықаралық химия олимпиадасының (IChO) тапсырмаларында, сонымен қатар Республикалық, студенттік олимпиадаларында және іріктеу кезеңдерінде кездеседі. Мұндай есептерді шешу алгоритмі жеткілікті дайындықпен күрделі емес және оған әдеттегі зертханалық жұмыстағы ЯМР-спектрлерді талдау үшін стандартты рәсімдер кіреді. Ядролық магниттік резонанстың теориялық негіздерін және химиялық жылжу табиғатын түсіну мұндай есептерді аса еңбексіз шешуге мүмкіндік береді. Ғылыми-зерттеу жұмысында ЯМР-спектроскопияны пайдаланудың практикалық тәжірибесінің болуы мұндай міндеттерді шешудің күрделілігін толығымен жоққа шығарады. Бұл мақалада стандартты алгоритмдердің көмегімен ЯМР спектрлерін талдауға байланысты есептерді шешу мысалдары қарастырылады.

**Кілт сөздер:** Химия пәні бойынша сайыстық есептер, химия пәні бойынша олимпиадалар, олимпиадаесептерін шешу, ядролық магниттік резонанс, ЯМР-спектроскопия

Akatyev Nikolay

**SOLVING OF OLYMPIAD TASKS IN CHEMISTRY WITH THE USE OF THE  
NUCLEAR MAGNETIC RESONANCESPECTRAANALYSIS**

**Annotation.** Problems involving the use of spectral data are increasingly encountered at chemistry contests at various levels. Mostly, such tasks are present in the tasks of the International Chemistry Olympiad (IChO), and also occur at the Republican, student Olympiads and qualifying stages. The algorithm for solving such problems, with sufficient training, is simple and includes procedures standard for the analysis of NMR spectra in routine laboratory work. Understanding the theoretical foundations of nuclear magnetic resonance and the nature of the chemical shift makes it possible to solve such problems without much difficulty. The presence of practical experience in the use of NMR spectroscopy in research work almost completely eliminates the complexity of solving such problems. In this article, examples of solving problems on NMR spectra using standard algorithms are considered.

**Keywords:** chemistry tasks; Chemistry Olympiads; Olympiad tasks in chemistry; solving Olympiad tasks; nuclear magnetic resonance; NMR spectroscopy.