

## **"Эффекты ориентации молекул в магнитных полях и жидких кристаллах в спектроскопии ЯМР"**

**Докладчик:** асп. 2 г/о К. Ф. Шеберстов

**Научный руководитель:** д.х.н. В. А. Чертков

**Рецензент:** к.х.н. Ю.Г. Колягин

Как правило, источниками информации, извлекаемой из спектров ЯМР высокого разрешения, служат химические сдвиги и константы спин-спинового взаимодействия (КССВ). Между тем в любом эксперименте ЯМР наблюдаемые ядра взаимодействуют между собой через диполь-дипольные взаимодействия, но из-за быстрых хаотических вращений молекул в изотропном растворе эти взаимодействия напрямую не проявляются в спектре, а сказываются лишь на релаксации. Ядра со спином больше  $\frac{1}{2}$  взаимодействуют с окружающим их градиентом электрического поля. Это так называемое квадрупольное взаимодействие также не проявляется в спектрах ЯМР в случае изотропной среды.

В ситуации, когда у исследуемых молекул в образце появляется некоторая усредненная ориентация относительно оси основного магнитного поля спектрометра, в спектрах ЯМР могут проявиться параметры, отвечающие диполь-дипольному и/или квадрупольному расщеплению. Оказывается, что величины этих расщеплений, характеризующиеся остаточными константами соответственно диполь-дипольного и квадрупольного взаимодействия, предоставляют качественно иную информацию о структуре и свойствах молекулы в растворе, нежели КССВ и химические сдвиги. Особая ценность остаточных констант диполь-дипольного взаимодействия заключается в том, что они могут характеризовать молекулу как единое целое.

В настоящем докладе будут рассмотрены теоретические аспекты анизотропных взаимодействий спектроскопии ЯМР, а также практическое использование в современных исследованиях данных явлений на примерах ориентационных эффектов молекул в магнитных полях и в жидких кристаллах.