



Научно-образовательный центр Института высокомолекулярных соединений РАН
при участии
Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова и
Санкт-Петербургского государственного университета
«КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСИСТЕМ В НАУКЕ О
МАТЕРИАЛАХ И БИОЛОГИИ»

**Образовательные семинары
«Современный физический эксперимент и обработка его результатов»**

Однодневный семинар для студентов и аспирантов

Павел Алексеевич Беляков (с.н.с., к.х.н., рук. гр. ИОХ РАН, г. Москва)

Спектроскопия ЯМР: основы, применение и квантово-химическое моделирование спектров

Спектроскопия ЯМР является одним из наиболее мощных экспериментальных методов в исследовании молекул. Многообразие методик ЯМР позволяет не только устанавливать первичную структуру химических соединений, но и используется для исследования пространственного строения сложных молекул, состава смесей и пр. Данный семинар даст общее представление о современных методах спектроскопии ЯМР и примерах их применения, в том числе при использовании возможностей моделирования спектров.

Краткая программа семинара:

- 11.00-13.00 *ЯМР в теории и на практике*
- ✓ Основные понятия, методы и их применение
 - ✓ Демонстрация видеоматериала: Подготовка образца, настройка оборудования и регистрация спектра ЯМР ^1H на спектрометре Bruker Avance-400
- 14.30-16.00 *Квантово-химическое моделирование спектров ЯМР*
- ✓ Общий обзор основных принципов моделирования спектров ЯМР
 - ✓ Практическое занятие: Моделирование спектров ЯМР в программе Priroda. Для самостоятельной работы необходимо иметь ноутбук.

Внимание! Количество участников ограничено: 15 человек. Необходима предварительная регистрация.

Заявки на участие направляйте *Люлину Сергею Владимировичу,*
e-mail: s.v.lyulin@gmail.com.

За неделю до начала семинара зарегистрированным участникам будет выслан список программного обеспечения, необходимого для самостоятельной работы на практических занятиях.

Место проведения: г.Санкт-Петербург, Биржевой проезд 6, ИВС РАН, комн. 152.

Время проведения: 16 марта 2012 г (пятница); 11.00-13.00, 14.30-16.00

Организаторы: д.ф.-м.н. С.В.Люлин, к.х.н. Ю.Е.Москаленко, асп. В.М.Назарычев.

Участие в семинаре – бесплатное.

