

- 1) растворимости в нем испытуемого соединения;
- 2) отсутствия перекрывания сигналов остаточных протонов дейтерированного растворителя с сигналами испытуемого соединения;
- 3) отсутствия взаимодействия между растворителем и испытуемым соединением, если не указано иначе.

Атомы растворителя дают сигналы, которые легко идентифицируются по их химическому сдвигу и могут использоваться для калибровки оси химического сдвига (вторичный эталон). Химические сдвиги сигналов остаточных протонов дейтерированных растворителей имеют следующие значения (м.д.): хлороформ – 7,26; бензол – 7,16; вода – 4,7; метанол – 3,35 и 4,78; диметилсульфоксид – 2,50; ацетон – 2,05; положение сигнала воды и протонов гидроксильных групп спиртов зависит от рН среды и температуры.

Для количественного анализа растворы не должны содержать нерастворенных частиц. При некоторых количественных определениях может потребоваться добавление внутреннего стандарта для сравнения интенсивности испытуемого и стандартного образцов. Соответствующие стандартные образцы и их концентрации должны быть указаны в нормативной документации. После помещения образца в пробирку и укупорки образец вводят в магнит ЯМР-спектрометра, устанавливают параметры испытания (параметры настройки, регистрации, оцифровки сигнала спада свободной индукции). Основные параметры испытания, приводимые в нормативной документации, записывают или сохраняют в компьютере.

Для предотвращения дрейфа спектра во времени выполняют стабилизационную процедуру (дейтериевый лок), используя сигнал дейтерия, вызываемый дейтерированными растворителями, если не указано иначе. Прибор регулируют для получения наиболее оптимальных условий резонанса и максимального соотношения S/N (*шуммирование*).

В ходе испытания возможно выполнение многократных последовательностей циклов «импульс – сбор данных – пауза» с