

## SATURS

1. Ievads .....	5
2. Kodolu magnētiskās rezonanses parādība .....	8
3. KMR spektrometru principiālā shēma un spektra raksturlielumi.....	11
4. Struktūras un vides faktoru ietekme uz signālu ķīmisko nobīdi $^1\text{H}$ -KMR spektroskopijā .....	16
4. 1. Aizvietotāju elektroniskie efekti .....	17
4. 2. Atomu grupu magnētiskā anizotropija.....	19
4. 3. Van der Vālsa mijiedarbība .....	23
4. 4. Šķīdinātāju ietekme .....	23
4. 5. Empīriskas likumsakarības aizvietotāju ietekmes prognozēšanai .....	24
5. Spinu sadarbība.....	31
5. 1. Spinu sistēmu apzīmējumi .....	33
5. 2. Spinu sadarbības interpretācija pirmās kārtas spektros.....	34
5. 3. Paramagnētisko nobīžu reaģenti.....	44
5. 4. Struktūras faktoru ietekme uz protonu spinu sadarbības konstantēm .....	45
5. 4. 1 Geminālā konstante .....	46
5. 4. 2. Vicinālā konstante .....	48
5. 4. 3. Tālās spinu sadarbības konstante .....	52
5. 5. $^{13}\text{C}$ , $^1\text{H}$ spinu sadarbība.....	54
5. 6. Dubultrezonanse un tās modifikācijas .....	55
5. 5.1. Spinu sadarbības izslēgšana.....	56
5. 5. 2. Kodolu Overauzera efekts (NOE) .....	58
6. Dinamiskie efekti KMR spektroskopijā. Apmaiņas procesi.....	59
7. $^{13}\text{C}$ -KMR spektroskopija .....	64
7. 1. Daļēja spinu $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$ sadarbības izslēgšana.....	65
7. 2. $^{13}\text{C}$ ķīmiskā nobīde .....	66
7. 3. $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$ spinu sadarbība.....	75
7. 4. $^{13}\text{C}$ spinu režģa relaksācijas ātrums .....	76
8. KMR spektra uzņemšana .....	77
8. 1. Eksperimentu raksturlielumi un metodika .....	83
8. 1. 1. Impulss .....	83
8. 1. 2. Dators.....	83
9. Divdimensionālā KMR spektroskopija .....	85
9.1. HH-COSY .....	85
9.2. CC-INADEQUATE .....	87
9.3. CH-COSY .....	88
9.4. CH-COLOC .....	90
9.5. HH-NOESY .....	91

10. Uzdevumi un to risinājumu paraugi.....	94
11. Literatūra .....	131

<b>1.pielikums.</b> Dažādu protonu grupu (struktūrfragmentu) ķīmisko nobīžu paredzami intervāli ( $\delta$ , ppm, standartviela TMS) .....	132
<b>2. pielikums.</b> Dažādu struktūrfragmentu $^{13}\text{C}$ ķīmisko nobīžu paredzami intervāli ( $\delta$ , ppm, standartviela TMS, $\text{CH}_3$ apzīmēti ar Q, $\text{CH}_2$ – ar T, CH – ar D, C – ar S ) .....	135
<b>3. pielikums.</b> $^1\text{H}$ - Ķīmiskās nobīdes ( $\delta$ , ppm) un spinu sadarbības konstantes (J, Hz) $^1\text{H}$ -KMR spektros .....	137
<b>4. pielikums.</b> $^{13}\text{C}$ - Ķīmiskās nobīdes ( $\delta$ , ppm) $^{13}\text{C}$ -KMR spektros.....	140
<b>5. pielikums.</b> Organisko savienojumu KMR spektru kolekcijas un uzdevumi internetā .....	143