

RTU studiju kurss "Kodolu magnētiskās rezonanses spektroskopija"**32000 Dabaszinātņu un tehnoloģiju fakultāte****Vispārējā informācija**

Kods	KTM105
Nosaukums	Kodolu magnētiskās rezonanses spektroskopija
Studiju kursa statuss programmā	Obligātais/Ierobežotās izvēles
Atbildīgais mācītspēks	Māris Turks - Doktors, Dekāns
Mācītspēks	Nelli Batenko - Doktors, Asociētais profesors Vitālijs Rjabovs - Doktors, Docents
Apjoms daļās un kredītpunktos	1 daļa, 3.0 kredītpunkti
Studiju kursa īstenošanas valodas	LV, EN
Anotācija	Studiju kursā apskatītas KMR parādība un tās pielietojums ķīmisko vielu struktūru noteikšanā. Apskatīti plaši lietojami spektru veidi – viendimensijas (1H, 13C, 19F, 31P), divdimensiju (H-H, H-X) spektri, kvadrupolāru kodolu spektri, to uzņemšanas aspekti un pielietojums gan molekulu, gan materiālu (polimēr-, bio- un silikātmateriālu) struktūras īpašību noteikšanā. Ir iespēja iepazīties ar modernu KMR spektrometru un programmatūru spektru uzņemšanai/apstrādei.
Mērķis un uzdevumi, izteikti kompetencēs un prasmēs	Studiju kursa mērķis ir izveidot izpratni par KMR spektroskopijas teorētiskajiem pamatiem un tās pielietojumu vielu struktūru un tīrības noteikšanai. Studiju kursa uzdevumi ir sniegt pamatzināšanas par KMR spektrometra uzbūvi, spektru uzkrāšanas pamatprincipiem, plaši lietojamu spektru izmantošanu molekulu un materiālu pētījumos, attīstīt spēju patstāvīgi izvēlēties savienojuma struktūras noteikšanai nepieciešamos KMR spektrus, kā arī izkopt prasmi pēc dotajiem spektriem noteikt vielas struktūrformulu.
Patstāvīgais darbs, tā organizācija un uzdevumi	Sagatavošanās praktiskajiem darbiem, kontroldarbiem un noslēguma eksāmenam, veicot patstāvīgi savienojumu struktūru atšifrēšanu no spektru datiem
Literatūra	Obligātā/Obligatory: 1. Valters, R. Kodolu magnētiskās rezonanses spektroskopija. Pamatkurss. Rīga: RTU, 2008. 141 p. 2. Lambert, J. B., Mazzola, E. P., Ridge, C. D. Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy: An Introduction to Principles, Applications, and Experimental Methods, 2nd Edition. John Wiley & Sons, 2019. 480 p. 3. Iggo, J. A. NMR Spectroscopy in Inorganic Chemistry. Oxford Science Publications, 1999. 96 p. Papildu/Additional: 1. MacKenzie, K., Smith, M. E. Multinuclear Solid-State Nuclear Magnetic Resonance of Inorganic Materials, Volume 6, 1st Edition. Pergamon, 2002. 748 p. 2. Hatada, K., Kitayama, T. NMR Spectroscopy of Polymers. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2004. 222 p. 3. Pretsch, E., Bühlmann, P., Badertscher, M. Structure determination of organic compounds. Tables of spectral data. 4th revised and enlarged ed. Berlin: Springer, 2009. 433 p. 4. Field, L.D., Sternhell, S., Kalman, J. R. Organic Structures from Spectra. 4th ed. Chichester: Wiley, 2008. 468 p. 5. Berger, S., Braun S. 200 and more experiments. A practical course. Wiley-VCH, 2004. 854 p.
Nepieciešamās priekšzināšanas	Zināšanas vispārīgajā un organiskajā ķīmijā.

Studiju kursa saturs

Saturs	Pilna un nepilna laika klātienē studijas		Nepilna laika neklātienē studijas	
	Kontakt stundas	Patstāv. darbs	Kontakt stundas	Patstāv. darbs
Ievads KMR teorijā: kodola spins, kodolu magnētiskais moments, žiromagnētiskā konstante, rezonanses parādība, rezonanses (Larmora) frekvence, relaksācijas procesi.	3	3	0	0
KMR spektrometra uzbūve un spektru uzkrāšanas pamatprincipi. Kontroldarbs par KMR teoriju.	3	3	0	0
Kodolu ar spinu 1/2 (1H, 13C, 15N, 19F, 29Si, 31P) spektru veidošanās, raksturlielumi, vielas struktūras ietekme uz spektriem. Praktiskie darbi un kontroldarbi par KMR spektru analīzi.	10	10	0	0
KMR spektru izmantošana molekulu un materiālu pētījumos. Praktiskie darbi auditorijā un kontroldarbi par struktūru noteikšanu pēc KMR spektriem.	4	6	0	0
Divkāršā un trīskāršā rezonanse, daudzzimensiju spektru izmantošana struktūru pētījumos. Praktiskais darbs un kontroldarbs par savienojumu struktūru noteikšanu pēc 2D KMR spektriem.	6	6	0	0
Cietvielu KMR: fizikālo parametru ietekme uz cietvielu spektriem, griešana zem maģiskā leņķa. Kvadrupolāro kodolu spektru uzņemšana.	4	4	0	0
Kontroldarbs par organisko struktūru noteikšanu pēc KMR spektriem.	2	2	0	0
Konsultācija pirms eksāmena.	2	0	0	0
Eksāmens.	6	6	0	0
Kopā:	40	40	0	0

Sasniedzamie studiju rezultāti un to vērtēšana

Sasniedzamie studiju rezultāti	Rezultātu vērtēšanas metodes
Izprot KMR parādības teorētiskos pamatus un spektroskopa uzbūvi un darbības principu, spēj sagatavot paraugu analīzei.	Pārbaudes veidi: kontroldarbi, eksāmens. Kritēriji: students spēj noteikt magnētiski aktīvos kodolus, izskaidrot to KMR spektru uzņemšanas priekšnosacījumus un procesu.
Izprot kodolu ar spinu 1/2 (¹ H, ¹³ C, ¹⁵ N, ¹⁹ F, ²⁹ Si, ³¹ P) KMR spektru veidošanās apstākļus un raksturlielumus, un vielas struktūras ietekmi uz spektriem, spēj raksturot konkrēto kodolu signālus spektros.	Pārbaudes veidi: kontroldarbi, eksāmens. Kritēriji: students spēj paredzēt spektra aptuveno izskatu atkarībā no vielas struktūras un noteikt KMR spektru raksturojošos parametrus (ķīmiskā nobīde, sadarbības konstante u.c.) no spektru datiem.
Izprot multidimensionālo KMR spektru būtību, spēj tos izmantot analītiskās informācijas iegūšanai.	Pārbaudes veidi: kontroldarbi, eksāmens. Kritēriji: students spēj izvēlēties nepieciešamos 2D spektrus un pēc tiem noteikt vielas struktūru.
Izprot KMR spektru pielietojumu savienojumu struktūras noteikšanā, spēj patstāvīgi izvēlēties nepieciešamos spektrus un noteikt vielas struktūru.	Pārbaudes veidi: kontroldarbi, eksāmens. Kritēriji: students spēj noteikt vielas struktūru no tās 1D- un 2D-KMR spektru datiem.

Studiju rezultātu vērtēšanas kritēriji

Kritērijs	% no kopējā vērtējuma
Kontroldarbi	60
Eksāmens	40
Kopā:	100

Studiju kursa plānojums

Daļa	KP	Stundas			Pārbaudījumi		
		Lekcijas	Prakt d.	Laborat	Ieskaite	Eksām.	Darbs
1.	3.0	1.0	1.0	0.0		*	