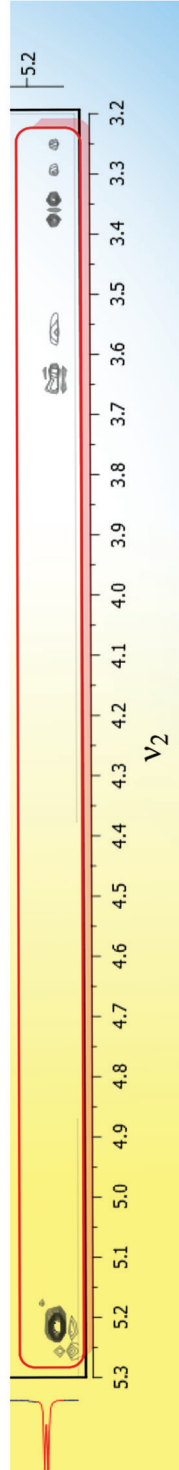
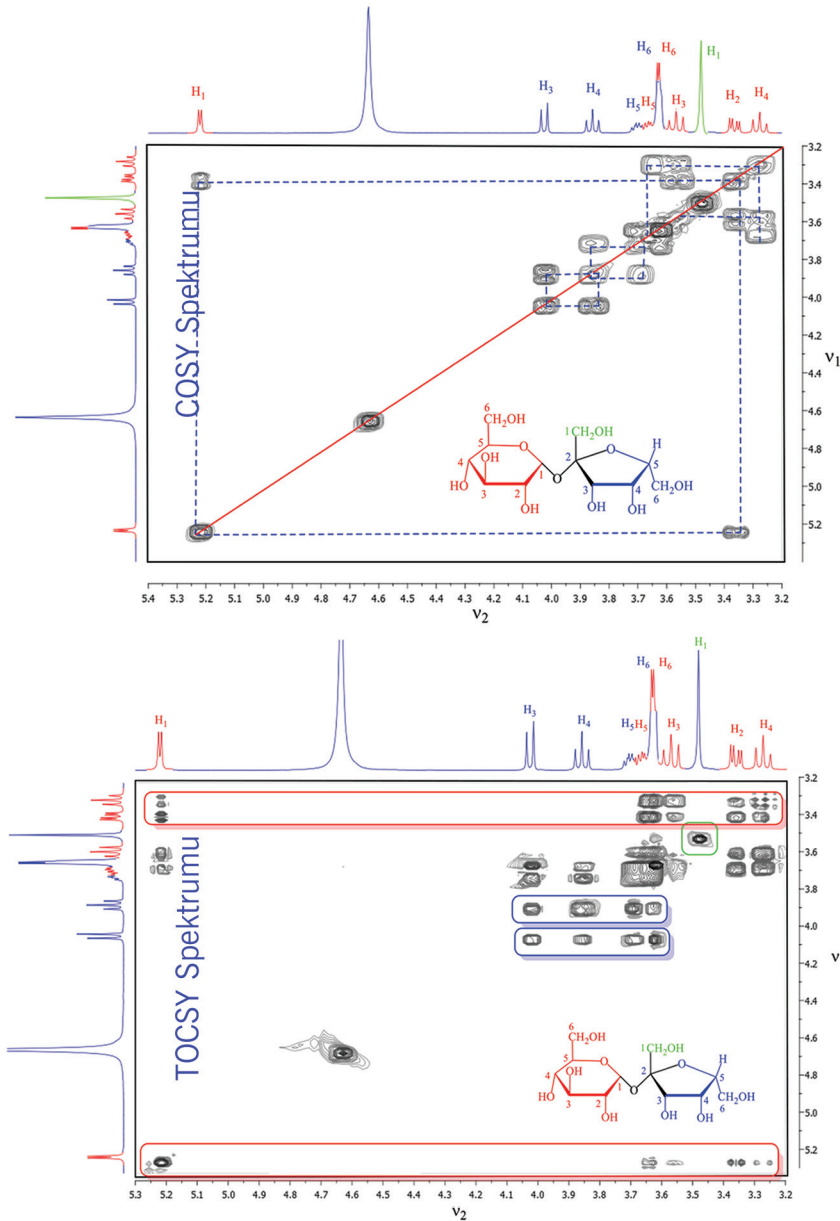
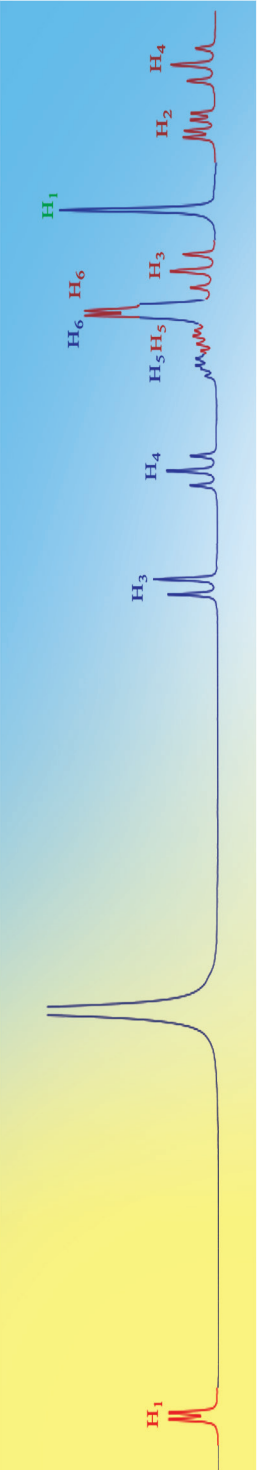


Nükleer Manyetik Rezonans Spektroskopisi

Prof. Dr. Metin BALCI



TÜRKİYE BİLİMLER AKADEMİSİ
TURKISH ACADEMY OF SCIENCES



TÜRKİYE BİLİMLER AKADEMİSİ
TURKISH ACADEMY OF SCIENCES

NÜKLEER MANYETİK REZONANS SPEKTROSKOPİSİ

Prof. Dr. Metin Balcı

2025



TÜRKİYE BİLİMLER AKADEMİSİ
TURKISH ACADEMY OF SCIENCES

NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE (NMR) SPECTROSCOPY

Prof. Metin Balcı

2025

Nükleer Manyetik Rezonans Spektroskopisi
Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectroscopy

Türkiye Bilimler Akademisi Ders Kitapları Serisi No: 15
Turkish Academy of Sciences Textbooks Series No: 15

ISBN: 978-625-6110-32-8

DOI: 10.53478/TUBA.978-625-6110-32-8

Türkiye Bilimler Akademisi
Turkish Academy of Sciences
Vedat Dalokay Caddesi No: 112 Çankaya 06670 Ankara
0 312 442 29 03 (pbx) • www.tuba.gov.tr

Yazar / Author

Prof. Dr. Metin Balcı

Grafik Tasarım / Graphic Design

Ece Yavuz

Kapak Tasarım / Cover Design

Gül Mengeş

Birinci Baskı / First Edition

750 Adet / 750 Pcs.

Baskı / Printed In

Ankara Basım Yayın Hizmetleri, Ankara

© Türkiye Bilimler Akademisi, 2025

Bu eserin tüm yayın hakları, Türkiye Bilimler Akademisi'ne aittir. Yayıncının yazılı izni olmadan kısmen veya tamamen basılamaz ve çoğaltılamaz. Eserden kaynak gösterilerek alıntı yapılabilir.

Kitabın dil, bilim, etik ve hukuk açısından bilimsel sorumluluğu yazara aittir. Türkiye Bilimler Akademisi'nin sorumluluğu bulunmamaktadır.

© Turkish Academy of Sciences, 2025

All publishing rights of this work belong to the Turkish Academy of Sciences. It may not be printed and reproduced partially or fully without the written consent of the publisher. It can be cited by providing full reference.

The author bears full scientific responsibility for the book in terms of language, scholarship, ethics and law. Turkish Academy of Sciences has no responsibility whatsoever.

Balcı, Metin

Nükleer Manyetik Rezonans Spektroskopisi / Metin Balcı. -- Ankara : Türkiye Bilimler Akademisi, 2025.
526 s. : res., tabl. ; 18,5 x 26,5 sm. – (Türkiye Bilimler Akademisi Ders Kitapları Serisi No ; 15)

Bibliyografya var.

ISBN 978-625-6110-32-8

1.Nükleer manyetik rezonans spektroskopisi. 2. Nuclear magnetic resonance spectroscopy. 3.

Nükleer fizik – rezonans. 4. Nuclear physics—resonance.

QD96 B35 2025

538.362

Eşim Jale'ye

SUNUŞ

Akademimizin Şeref Üyesi Prof. Dr. Metin Balcı tarafından kaleme alınan *Nükleer Manyetik Rezonans Spektroskopisi* başlıklı kitabı, TÜBA olarak yayımlamaktan büyük bir mutluluk duyduğumu ifade etmek isterim.

Bugün halk arasında “Emar” (MR) olarak bilinen Manyetik Rezonans Görüntüleme cihazları, hidrojen atomlarının manyetik alan içerisindeki rezonansına dayanır. İlk NMR (Nükleer Manyetik Rezonans) ölçümü 1938 yılında gerçekleştirilmiş olup, fizikçiler tarafından geliştirilen bu yöntemin kimyasal bileşiklerin yapı tayininde kullanılabileceği, 1950’li yıllarda kimyacılar tarafından keşfedilmiştir. Günümüzde NMR, kimyacıların *olmazsa olmaz* cihazıdır. Ayrıca iki boyutlu NMR ölçüm teknikleri de kimyacılar tarafından geliştirilmiştir. NMR alanına katkılarından dolayı fizikçilere ve kimyacılar birçok kez Nobel Ödülü takdim edilmiştir.

Şu anda tıp alanında (in vivo uygulamalarda) yalnızca proton NMR kullanılırken, kimyacılar NMR’da aktif olan tüm elementleri (özellikle ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{17}O , ^{31}P vb.) NMR ile incelemektedirler. Bu elementlerin insan kimyasındaki önemi göz önüne alındığında, yakın gelecekte farklı elementlerin insan vücudunda da ölçülebileceği öngörülmektedir.

NMR ölçümlerinin yanı sıra, elde edilen spektrumların yorumlanması büyük önem taşımaktadır. Şeref Üyemiz Prof. Dr. Metin Balcı tarafından hazırlanan bu kitap, üniversitelerimizin lisans ve lisansüstü düzeylerinde okutulan *NMR Spektroskopisi* dersleri ve spektrumların yorumlanması için değerli bir kaynak olmasının yanı sıra her seviyedeki araştırmacıya rehberlik edecektir.

Kitabın ilk baskısı 2000 yılında METU Press, İngilizce baskısı ise 2005 yılında Elsevier tarafından yayımlanmıştır. Bu yeni baskıya eklenen güncel konular ve özellikle iki boyutlu (2D) ölçüm tekniklerine ayrılan genişletilmiş kapsam, kitabı daha da zenginleştirmiştir.

Akademi Şeref Üyemiz Prof. Dr. Metin Balcı’nın emeklilik döneminde kaleme aldığı ve TÜBA tarafından yayımlanan eserleriyle bilime sağladığı katkılardan dolayı şahsım ve akademimiz adına kendisine şükranlarımı sunarım.

Prof. Dr. Muzaffer Şeker
TÜBA Başkanı

ÖNSÖZ

Nükleer Manyetik Rezonans (NMR) Spektroskopisi, kimya alanı dışındaki araştırmacılar tarafından da yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Kimyacılar için NMR cihazı, molekül yapılarını belirlemede vazgeçilmez bir araç olarak kabul edilir. Yapı tayininin yanı sıra NMR, molekül içi dinamik dengelerin ve bazı fiziksel parametrelerin belirlenmesinde de başarılı bir şekilde uygulanmaktadır.

NMR spektroskopisi cihazını yoğun bir şekilde kullanan bir araştırmacı olarak, başlangıçta bu alanda bir kitap yazma düşüncesine sahip değildim. Ancak, ülkemizde NMR konusunda yeterli kaynak bulunmaması, bu konuda bir eser ortaya koyma gerekliliğini doğurdu. İlk olarak, 1986 yılında 200 sayfalık bir NMR kitabı yayımladım. Daha sonra bu kitabın genişletilmiş şekli, 2000 yılında Orta Doğu Teknik Üniversitesi (METU Press) tarafından ve eserin İngilizce çevirisi ise 2005 yılında Elsevier tarafından yayımlandı.

Bu süreçte beş baskı yapan kitap, içerik bakımından daha da zenginleştirilerek son hâlini aldı. Son baskıda özellikle iki boyutlu (2D) NMR tekniklerine geniş bir şekilde yer verildi ve yeni ölçüm yöntemleri eklendi. Ayrıca, alıştırmalar bölümü tamamen yenilendi ve spektrumlar gerçek kimyasal kayma değerleri kullanılarak simüle edildi. Okuyucunun dikkatini çekmek amacıyla ilgili sinyallerin ayrıntıları öne çıkarıldı ve örnek spektrum sayısı artırıldı.

Kitapta, NMR ölçüm mekanizmaları detaylı bir şekilde ele alınmış olup, doğru yorumların yapılabilmesi için gerekli teorik altyapı sunulmuştur. Özellikle flor ve fosfor atomlarıyla çalışan kimyacılar için “Flor ve Fosfor NMR Spektroskopisi” başlıklı iki bölüm eklendi. Bu bölümlerde, bu atomların ^1H ve ^{13}C NMR spektrumları üzerindeki etkileri açıklanarak, araştırmacıların analizlerine katkı sağlanması hedeflendi.

Bu kitapta yer alan spektrumların büyük bir bölümü, Atatürk Üniversitesi ve Orta Doğu Teknik Üniversitesi’ndeki değerli öğrencilerimin üstün çabaları sonucunda sentezlenen özgün bileşiklere aittir. Spektrumların önemli bir kısmı, Prof. Dr. Cavit Kazaz tarafından kaydedilmiştir. İlk baskıda olduğu gibi bu son baskıda da Cavit, büyük bir sabır, özveri ve titizlikle bazı ölçümleri defalarca tekrarlayarak eserin oluşumuna önemli katkılarda bulundu. Kendisine içten teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca, sağladıkları spektrumlar dolayısıyla Prof. Dr. İlker Avan’a, Prof. Dr. Arif Daştan ve öğrencilerine ve Prof. Dr. Emine Salancı’ya da teşekkür ederim.

Kitabın tamamını büyük bir dikkat ve titizlikle gözden geçirerek eleştirilerde bulunan Orta Doğu Teknik Üniversitesi öğretim üyesi Doç. Dr. Çağatay Dengiz ve çalışma grubundaki değerli öğrencileri; Hazal Kayaş, Işıl Irmak Uzungel, Efe Çelik, Kübra Erden, Nazlıcan Doğan, Huseynaga

Abasov, Ege Arsan, Berfin Üren, Ümit Yasin Ürel, Zeynep Arslan, Arzu Arabacı, Pelinsu Akay, Furkan Melih Günay, Fevzi Can İnyurt, Can Bozdemir, İpek Öktem ve Murat Can Kılıç'a içtenlikle teşekkür ederim.

Ayrıca, kitabın bazı bölümlerini gözden geçirerek geliştirilmesine yönelik değerli eleştirilerde ve önerilerde bulunan aşağıdaki meslektaşlarıma da minnettarlığımı sunarım.

Arif Daştan	Atatürk Üniversitesi
Cavit Kazaz	Atatürk Üniversitesi
Çağatay Dengiz	Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Dilem Şengül Doğan	Erciyes Üniversitesi
Emine Salancı	Atatürk Üniversitesi
Hamdullah Kılıç	Atatürk Üniversitesi
İlker Avan	Anadolu Üniversitesi
Nurettin Mengeş	Necmettin Erbakan Üniversitesi
Nurullah Saraçoğlu	Atatürk Üniversitesi
Serdal Kaya	Necmettin Erbakan Üniversitesi
Yasin Çetinkaya	Atatürk Üniversitesi
Yavuz Taşkesenligil	Atatürk Üniversitesi
Yunus Emre Türkmen	Bilkent Üniversitesi

Bu kitabın basımında gösterdikleri fedakarlıklar ve verdikleri destekler için Türkiye Bilimler Akademisi (TÜBA) Başkanı Sayın Prof. Dr. Muzaffer Şeker'e, kitabın grafik tasarımını büyük bir özveriyle gerçekleştiren Tasarımcı Ece Yavuz'a, eserin TÜBA'ya ulaşmasından yayımlanmasına kadar geçen süreçte koordinasyonu sağlayan TÜBA Uzmanı Asiye Komut'a ve kapak tasarımını üstlenen Necmettin Erbakan Üniversitesi Öğr. Gör. Gül Mengeş'e içtenlikle teşekkür ederim. Onlardan aldığım mükemmel destek olmaksızın bu kapsamlı eserin hazırlanması mümkün olamazdı.

Ayrıca, diğer çalışmalarımda olduğu gibi bu eserin hazırlanmasında da bana verdiği büyük destek, gösterdiği sabır ve yazma sürecindeki anlayışı nedeniyle sevgili eşim Jale'ye minnettar olduğumu ifade eder, kendisine sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Metin Balcı (Emekli)
Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Kimya Bölümü
email: mbalci@metu.edu.tr
Nisan 2025, İzmir

YAZAR HAKKINDA

ORCID: 0000-0003-4443-9245



Eşi Jale ile

Metin Balcı, 1948 yılında Erzurum’da doğmuştur. Lise eğitimini Erzurum’da tamamladıktan sonra, 1965 yılında yükseköğrenim için Almanya’ya gitmiştir. 1972 yılında Köln Üniversitesi, Fen Fakültesi Kimya Bölümü’nden mezun olmuştur. 1976 yılında aynı üniversitede Prof. Dr. Emanuel Vogel danışmanlığında organik kimya alanında doktora unvanı almıştır.

Balcı, doktora sonrası araştırmalarını Almanya, Siegen Üniversitesi’nden Prof. Harald Günther, Puerto Rico (USA) Üniversitesi’nden, Prof. Waldemar Adam ve Florida (USA) Üniversitesi’nden Prof. W. M. Jones ile yapmıştır. 1980 yılında Atatürk Üniversitesi Kimya Bölümü’nde doktor asistan olarak akademik kariyerine başlamış, 1981 yılında doçent, 1987 yılında ise profesör unvanını almıştır. 1986 yılında misafir araştırmacı olarak Köln Üniversitesi’nde ve 1996-1997 yıllarında Auburn Üniversitesi’nde (ABD) görev yapmıştır. 1997 yılında Orta Doğu Teknik Üniversitesi Rektörlüğü’nün daveti üzerine ODTÜ’ye geçmiş ve 2015 yılında emekli olmuştur.

Metin Balcı, kariyeri boyunca pek çok prestijli ödül kazanmıştır. Bunlar arasında 1983 yılında Türkiye Bilimsel ve Teknik Araştırma Kurumu’ndan TÜBİTAK Teşvik Ödülü, 1989 yılında TÜBİTAK Bilim Ödülü ve 1990 yılında Kimya Vakfı tarafından “Kimya Ödülü” yer almaktadır. Ayrıca, Kültür Bakanlığı tarafından 1991 yılında Bilim Çağı Ödülü ile onurlandırılmıştır. 2000, 2003 ve 2004 yıllarında Orta Doğu Teknik Üniversitesi tarafından ODTÜ Yılın En İyi Eğitimcisi Ödülünü almıştır. 2010 yılında Atatürk Üniversitesi Kimya Bölümü’ndeki NMR laboratuvarlarına adı verilmiştir. Balcı, Türk Bilim Akademisi’nin seçilmiş üyesi olup uluslararası hakemli dergilerde

282 bilimsel makale yayımlamış ve Google Scholar verilerine göre bu çalışmalara 7.246 kez atıfta bulunulmuştur.

Araştırma alanları arasında hidrokarbonların fotooksijenasyonu, polioksijenli doğal ürünlerin total sentezi, yüksek sıcaklık brominasyonu, gerilimli hidrokarbonlar, fotokimya ve heterosiklik bileşikler yer almaktadır.

Yoğun araştırmaların yanı sıra yazmış olduğu ders kitapları ile de eğitime önemli katkılar sunan Balcı'nın yazmış olduğu kitapları şunlardır:

Nükleer Manyetik Rezonans Spektroskopisi, METU PRESS, 2005.

Basic ¹H- and ¹³C-NMR Spectroscopy, Elsevier, 2005.

Organik Kimya Reaksiyon Mekanizmaları (1. Baskı), TÜBA, 2009.

Organik Kimya Reaksiyon Mekanizmaları (Genişletilmiş 4. Baskı), TÜBA, 2021.

Doğudan Yükselen Bilim (Otobiyografi), TÜBA, 2019.

Reaction Mechanism in Organic Chemistry, WILEY-VCH, 2022.

Modern Heterosiklik Kimya, TÜBA, 2023.

Nükleer Manyetik Rezonans Spektroskopisi (Genişletilmiş Baskı), TÜBA, 2025.

Akademik çalışmaları dışında Balcı, doğa gözlemleri, yürüyüş, kayak ve kitap okumak gibi açık hava aktivitelerine ilgi duymakta ve seyahat etmekten keyif almaktadır.

ABOUT THE AUTHOR

ORCID: 0000-0003-4443-9245

Metin Balcı was born in Erzurum in 1948. After completing his high school education in Erzurum, he went to Germany for higher education in 1966. He graduated from the Faculty of Science, Department of Chemistry at the University of Cologne in 1972. In 1976, he received his Ph.D. degree in organic chemistry under the supervision of Prof. Dr. Emanuel Vogel at the same university.

He conducted postdoctoral research with Professors Harald Günther (Siegen, Germany), Waldemar Adam (Puerto Rico, USA), and W. M. Jones (Florida, USA). He began his academic career as a doctoral assistant in the Department of Chemistry at Atatürk University in 1980, where he was promoted to associate professor in 1981 and full professor in 1987. As a guest professor, he worked at the University of Cologne in 1986 and at Auburn University (USA) from 1996 to 1997. In 1997, he relocated to Middle East Technical University in Ankara due to its exceptional reputation.

Metin Balcı has received numerous prestigious awards throughout his career. These include the “Junior Research Prize” in 1983 and the “Scientific Award” from the Scientific and Technical Research Council of Turkey in 1989. In recognition of his significant contributions, he was honored with the “Science Prize” by the Science and Technology Foundation in 1990, the “Chemistry Prize” by the Chemistry Foundation, and the “Science Prize” by the Ministry of Culture in 1991. He received the “Distinguished Teaching Award” at Middle East Technical University and was recognized as the “Best Teacher of the Year” in 2000, 2003, and 2004. In 2010, the NMR laboratories in the Department of Chemistry at Atatürk University were named after him. He is an elected member of the Turkish Academy of Sciences. Balcı has published 282 scientific articles in international peer-reviewed journals, and according to Google Scholar data, these works have been cited 7.246 times.

His research interests include the photooxygenation of hydrocarbons, total synthesis of polyoxygenated natural products, high-temperature bromination, strained hydrocarbons, photochemistry, and heterocyclic compounds.

In addition to his extensive research, Balcı has made significant contributions to education through the textbooks he has authored. The books written by Balcı are listed below:

Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, METU PRESS, 2005.

Basic ^1H - and ^{13}C -NMR Spectroscopy, Elsevier, 2005.

Organic Chemistry Reaction Mechanisms (1st Edition), TÜBA, 2009.

Science Rising from the East (Autobiography), TÜBA, 2019.

Organic Chemistry Reaction Mechanisms (Expanded 4th Edition), TÜBA, 2021.

Reaction Mechanism in Organic Chemistry, WILEY-VCH, 2022.

Modern Heterocyclic Chemistry, TÜBA, 2023.

Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy (Expanded Edition), TÜBA, 2025.

Balcı is interested in outdoor activities such as nature observation, hiking, skiing, and reading outside his academic work. He also enjoys traveling.

ÖZET

Nükleer Manyetik Rezonans (NMR) Spektroskopisi, çekirdeklerin manyetik alanda rezonansına dayanan bir yöntem olup, moleküllerin kimyasal yapılarını, molekül içi dinamik dengelerini ve fiziksel parametrelerini belirleyen önemli bir tekniktir. Bu kitabın amacı, lisans ve yüksek lisans seviyesindeki öğrencilere ve diğer araştırmacılara, NMR'ın temel prensipleri ve NMR spektrumlarının nasıl yorumlanacağı hakkında bilgi sunmaktır.

Proton NMR bölümünde, kimyasal kayma ve protonlar arasındaki etkileşme sabitleri tartışılmaktadır. Bu bölümde ayrıca, farklı protonlarla yapılan etkileşmelerde rezonans sinyallerinin nasıl değiştiği ayrıntılı bir şekilde açıklanmaktadır. Ayrıca, birinci derece spektrumlarla ikinci derece spektrumlar arasındaki farklar örneklerle gösterilmektedir. Proton NMR bölümünde, çift rezonans ve dinamik NMR konularına da yer verilmektedir.

Kitabın ikinci bölümü, karbon çekirdeklerinin kimyasal kayma ve etkileşme sabitlerine ayrılmıştır. Bu bölümde ayrıca rezonans olayı ve mekanizması detaylı bir şekilde tartışılmaktadır. Kitabın üçüncü ve dördüncü bölümlerinde, çoklu puls deneyleri ve bu deneylerin sonucunda elde edilen iki boyutlu NMR spektrumlarının oluşum mekanizmaları açıklanmaktadır. İki boyutlu NMR bölümünde COSY, TOCSY, NOESY, HETCOR, HSQC, HMQC, HSQC-TOCSY, INADEQUATE gibi ölçüm yöntemleri için çeşitli örnekler verilmektedir.

Kitapta, flor ve fosfor atomu içeren bileşiklerin proton ve karbon NMR spektrumları ile, flor ve fosfor atomlarının, ^1H ve ^{13}C NMR spektrumlarını nasıl değiştirdiği ile ilgili iki bölüm (^{19}F ve ^{31}P NMR Spektroskopisi) eklenmiş ve spektrumlarda beklenen değişiklikler örneklerle gösterilmiştir.

Alıştırmalar kısmı oldukça genişletilmiştir. Bu bölümde verilen spektrumlar, moleküllerin gerçek kimyasal kayma değerleri kullanılarak simüle edilmiştir. Dar bir bölgede rezonans olan sinyaller açılarak, okuyucunun spektrumları daha kolay yorumlayabilmesi amacıyla genişletilmiş şekilde sinyaller üzerinde tekrar çizimler yapılmıştır.

Bu şekilde hazırlanan kitabın yeni ve genişletilmiş baskısının tüm araştırmacılara faydalı olacağı kanaatindeyim.

SUMMARY

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectroscopy, based on the resonance of nuclei in a magnetic field, is a technique used to determine not only the chemical structures of molecules but also their intramolecular dynamic processes and certain physical data. The aim of this book is to provide information on the fundamental principles of NMR and how to interpret NMR spectra to undergraduate and graduate students, as well as other researchers.

In the ^1H NMR section, chemical shifts and coupling constants between protons are discussed. This section also explains how the resonance signals change in interactions with different protons. Furthermore, the differences between first-order and second-order spectra are demonstrated with examples. The proton NMR section also covers topics such as double resonance and dynamic NMR.

The second chapter of the book is dedicated to the chemical shifts and coupling constants of carbon nuclei. Additionally, the resonance phenomenon and its mechanism are discussed in detail. The third and fourth chapters of the book describe multi-pulse experiments and the formation mechanisms of two-dimensional NMR spectra. In the two-dimensional NMR section, various measurement techniques such as COSY, TOCSY, NOESY, HETCOR, HSQC, HMQC, HSQC-TOCSY, and INADEQUATE are presented with examples.

The book also includes two sections titled “ ^{19}F and ^{31}P NMR Spectroscopy”, highlighting how the presence of fluorine or phosphorus atoms in compounds affects the proton and carbon NMR spectra. The expected changes in the spectra are demonstrated with examples.

The exercises section has been significantly expanded. The spectra presented in this section have been simulated using the actual chemical shift values of the molecules. Signals in a narrow resonance region have been expanded and redrawn with additional details to help the reader interpret the spectra more easily.

I believe this newly revised and expanded book edition will benefit all researchers.

İÇİNDEKİLER

Sunuş	vii
Ön Söz	ix
Yazar Hakkında	xi
About the Author	xiii
Özet	xv
Summary	xvii

1. BÖLÜM 1^H NMR SPEKTROSKOPİSİ

1.1. Giriş	1
1.1.1. NMR Spektroskopisinin Gelişimi.....	9
Referanslar	10
1.2. Rezonans Olayı	11
1.2.1. Atom Çekirdeklerinin Manyetik Özellikleri	11
1.2.2. Çekirdeklerin Spin Kuantum Sayıları	13
1.2.3. Atom Çekirdeklerinin Manyetik Alanda Davranışı	15
1.2.4. Manyetik Bir Dipolün Manyetik Alanda Enerjisi	16
1.2.5. Rezonans Olayı ve Rezonans Koşulu	19
1.2.6. Manyetik Alan İçerisinde Çekirdeklerin Enerji Seviyelerinin Dağılımı	22
1.2.7. Durulma Olayı (Rölaksasyon)	23
1.2.8. Piklerin İntegrasyonu	25
1.2.9. NMR Cihazının Çalışma Prensibi	26
1.3. Kimyasal Kayma	28
1.3.1. Atom Çekirdeğinin Çevresinde Oluşan Lokal Manyetik Alanlar	28
1.3.2. NMR'da Pik Yerlerinin Belirlenmesi ve NMR Spektrumlarında Skala	33

1.3.3. NMR Ölçümü için Numune Hazırlanması ve NMR Çözücülerini	37
1.4. Kimyasal Kaymayı Etkileyen Faktörler	39
1.4.1. Elektron Yoğunluğunun Kimyasal Kaymaya Etkisi	41
1.4.2. Komşu grupların Kimyasal Kaymaya Etkisi	50
1.4.2.1 Aromatik Bileşikler: Diyamanyetik Halka Akımı	50
1.4.2.2. Antiaromatik Bileşikler: NMR Spektrumları ve Paramanyetik Halka Akımı	58
1.4.2.3. Sübstitüe Aromatik Bileşiklerde Kimyasal Kayma Değerleri	60
1.4.2.4. Karbon-Karbon (C=C) ve Karbon-Oksijen (C=O) Çift Bağlarının Oluşturduğu Manyetik Anizotropi ve Kimyasal Kaymaya Olan Etkileri	70
1.4.2.5. Karbon-Karbon Üçlü Bağlarının (C≡C) Oluşturduğu Manyetik Anizotropi ve Kimyasal Kaymaya Olan Etkileri	82
1.4.2.6. Karbon-Karbon (C-C) ve Karbon-Hidrojen (C-H) Tek Bağlarının Oluşturduğu Manyetik Anizotropi ve Kimyasal Kaymaya Olan Etkileri	85
1.4.2.7. Sterik İtmelerin (van der Waals Etkisi) Kimyasal Kaymaya olan Etkileri	89
1.4.2.8. Konsantrasyon, Çözücü ve Sıcaklığın Kimyasal Kaymaya Etkisi	91
Referanslar	92
1.4.3. Alıştırmalar	93
1.5. Spin-Spin Etkileşmesi	106
1.5.1. Spin-Spin Etkileşmeleri (Piklerin Yarılmalari)	106
1.5.2. Spin Kuantum Sayısı $I = \frac{1}{2}$ den Farklı Atomlarla olan Spin-Spin Etkileşmeleri (Piklerin Yarılmalari)	121
1.5.3. Spin-Spin Etkileşme Mekanizması	123
1.5.4. Spin-Spin Etkileşmesini Etkileyen Faktörler	125
1.5.4.1. Geminal Etkileşme Sabitleri 2J	127
1.5.4.1.1. Etkileşen Protonların Bağlı Olduğu Karbon Atomunun Hibridizasyonu	127
1.5.4.1.2. Geminal etkileşen protonlar arasındaki ϕ açısı	128
1.5.4.1.3. Sübstitüentlerin Elektronegatif Etkisi	130
1.5.4.1.4. Komşu π -Bağlarının Geminal Etkileşme Sabitlerine Etkisi	131
1.5.4.1.5. Geminal Etkileşme Sabitlerinin Ölçülmesi	134
1.5.4.2. Visinal Etkileşme Sabitleri 3J	135
1.5.4.2.1. Dihedral Açısı ϕ 'nin Visinal Etkileşme Sabitlerine Etkisi	135
1.5.4.2.2. Valans Açısı θ 'nin Visinal Etkileşme Sabitlerine Etkisi	141
1.5.4.2.3. C-C Bağ uzunluğu ile π -Bağ Derecesinin Visinal Etkileşme Sabitlerine Etkisi	142
1.5.4.2.4. Sübstitüentlerin Elektronegatifliklerinin Visinal Etkileşme Sabitlerine Etkisi	144

1.5.4.3. Uzun Mesafe Etkileşme Sabitleri ⁴ J, ⁵ J	145
1.5.4.3.1. Alilik Etkileşmeler ⁴ J	146
1.5.4.3.2. Homoalilik Etkileşmeler ⁵ J	147
1.5.4.3.3. Aromatik Sistemlerde Uzun Mesafe Etkileşmeler, ⁴ J ve ⁵ J	149
1.5.4.3.4. Doymuş Halkalı Sistemlerde Gözlenen Uzun Mesafe Etkileşmeler	151
1.5.4.4. Sıcaklığın Etkileşme Sabitlerine Olan Etkisi	152
Referanslar	153
1.6. Bir Protonun Farklı Protonlarla Etkileşmesi	155
1.6.1. Bir Protonun Farklı Protonlarla Etkileşmesinde Geçerli Temel Kurallar	155
1.6.2. Farklı Protonlarla Etkileşmeler için Örnekler	161
1.6.3. Alıştırmalar	167
1.7. Spin Sistemleri	182
1.7.1. İkinci Derece Spektrumlar	182
1.7.2. İkili Spin Sistemleri	184
1.7.2.1. A ₂ , AB ve AX Spin Sistemleri	184
1.7.2.2. AB Sistemleri ve Molekül Geometrisi	195
1.7.2.3. Asimetrik Merkezlerin Komşu Protonlar Üzerine Etkisi: AB Sistemleri	197
1.7.3. Üçlü Spin Sistemleri: A ₃ , A ₂ B (AB ₂), A ₂ X (AX ₂), Sistemleri	203
1.7.3.1. Üçlü Spin Sistemleri: ABC ve ABX Sistemleri	209
1.7.4. Dörtlü Spin Sistemleri: A ₂ B ₂ , A ₂ X ₂ , AA'BB' ve AA'XX' Sistemleri	213
Referanslar	225
1.8. Çift Rezonans Olayı ve Kaydırıcı Reaktifler	226
1.8.1. Çift Rezonans Olayı	226
1.8.2. Kaydırıcı Reaktifler	231
Referanslar	238
1.9. Dinamik NMR Spektroskopisi	238
1.9.1. Temel Teoriler	239
Referanslar	242
1.10. Alıştırmalar	242
1.10.1. Bir Molekülde Farklı Proton Sayılarının Belirlenmesi	243
1.10.2. Moleküller Arasında Ayrım	245
1.10.3. Yapı Tayini	247
1.10.4. Karışım Analizi	263
1.10.4.1. Karışım Analizi için Örnekler	265

2. BÖLÜM

¹³C NMR SPEKTROSKOPİSİ

2.1. Genel Bilgiler	267
2.1.1. Giriş	267
2.1.2. ¹ H ve ¹³ C Çekirdeklerinin Karşılaştırılması	267
2.1.3. ¹³ C Çekirdeklerinin Duyarlılığını Etkileyen Faktörler	268
2.1.4. ¹³ C NMR Spektroskopisinde Ölçüm Hassasiyetini Artırmak için Uygulanan Yöntemler	270
2.2. Absorpsiyon ve Rezonans Olayı	273
2.2.1. Absorpsiyon ve Rezonans Olayının Klasik Olarak İncelenmesi	273
2.2.2. Spin Sistemlerinde Durulma (Rölaksasyon)	278
2.2.3. Durulma (Rölaksasyon) Mekanizması	280
Referanslar	281
2.3. Puls NMR Spektroskopisi	282
2.3.1. Puls NMR Spektroskopisine Giriş	282
2.3.2. CW (Continuous Wave) ve FT (Fourier Transform) Yöntemleri	282
2.3.3. Monokromatik bir Radyo Frekansının bir Çekirdekle Etkileşimi	284
2.3.4. Puls Yöntemi ve Fourier Transformasyonu	286
2.4. ¹³ C NMR Ölçme Teknikleri	292
2.4.1. Rutin ¹³ C NMR Ölçme Teknikleri	292
2.4.2. Geniş Bantlı Işınlama (Broad-Band Decoupling)	293
2.4.3. Nükleer Overhauser Etkisi (NOE)	295
2.4.4. ¹ H ile Etkileşen ¹³ C Spektrumlarının Ölçülmesi: Aralıklı Geniş Bantlı Işınlama (Gated Decoupling)	305
2.4.5. Kantitatif Karbon Ölçümü (Inverse Gated Decoupling)	308
2.4.6. Numune Hazırlanması ve Çözücüler	310
Referanslar	311
2.5. Kimyasal Kayma	311
2.5.1. Genel Bilgiler	311
2.5.2. Kimyasal Kaymayı Etkileyen Faktörler	315
2.5.2.1. Hibritleşmenin Kimyasal Kaymaya Etkisi	315
2.5.2.2. Elektronik Etkenler	315
2.5.2.3. Sterik Etkenler (γ -Gauch Etkisi)	319
Referanslar	321
2.6. Organik Bileşiklerin ¹³ C Kimyasal Kayma Değerleri	322

2.6.1. Alkanlar	322
2.6.2. Sübstitüe Alkanlar	325
2.6.3. Sikloalkanlar	328
2.6.4. Alkenler	332
2.6.5. Aromatik Bileşikler	339
2.6.6. Karbonil Bileşikleri	346
2.6.7. Heterosiklik Bileşikler	352
2.6.7.1. Doymuş Heterosiklik Bileşikler	352
2.6.7.2. Doymamış Heterosiklik Bileşikler	353
Referanslar	355
2.7. Spin-Spin Etkileşmesi	356
2.7.1. Tek Bağ Üzerinden olan Etkileşmeler ($^1J_{CH}$)	356
2.7.2. Tek Bağ Üzerinden Karbon-Döteryum Etkileşmesi ($^1J_{CD}$)	364
2.7.3. İki Bağ Üzerinden olan Etkileşmeler ($^2J_{CH}$): Geminal Etkileşmeler	365
2.7.4. Üç Bağ Üzerinden olan Etkileşmeler ($^3J_{CH}$): Visinal Etkileşmeler	367
Referanslar	369

3. BÖLÜM

ÇOKLU PULS DENEYLERİ

3.1. Giriş	371
3.2. Durulma (Rölaksasyon) Zamanlarının Ölçülmesi	372
3.1.1. Spin-Örgü Durulma Zamanı T_1 'in Ölçülmesi: İnverziyon-Geri Dönüşüm Yöntemi (Inversion-Recovery)	372
3.1.2. xy-Düzleminde Transversal Durulma	378
3.1.3. Spin-Eko Olayı ve Transversal Durulmanın Ölçülmesi	379
3.1.4. J-Modüle Spin-Eko Deneyleri (J-Modülasyonu)	382
3.1.5. APT (Attached Proton Test) Spektrumlar	382
3.1.6. Popülasyon Transferi: Selektif Popülasyon Transferi (SPT) ve Selektif Popülasyon İnverziyonu (SPI)	391
3.1.7. INEPT Deneyi: Duyarlılığı Az Olan Çekirdeklerin Popülasyon İnverziyonu ile Ölçümü	398
3.1.8. Odaklanmış INEPT Deneyi	400
3.1.9. DEPT Deneyi: CH , CH_2 ve CH_3 Karbonlarının Belirlenmesi	403
Referanslar	408

4. BÖLÜM

İKİ BOYUTLU (2D) NMR SPEKTROSKOPİSİ

4.1. Giriş	409
4.2. 2D NMR Spektroskopisinin Temel Teorisi	415
4.3. COSY Deneyi: İki Boyutlu Homonükleer Korelasyon Spektroskopisi	419
4.4. TOCSY (HOHAHA) Spektroskopisi: Protonların Bir Zincir Üzerinden Etkileşmelerinin Korelasyonu	430
4.5. İki Boyutlu Heteronükleer Korelasyon Spektroskopisi: HETCOR, HMQC ve HSQC Deneyi	439
4.6. HSQC-TOCSY Spektroskopisi: TOCSY Sinyallerinin Karbon Üzerine Taşınması ...	444
4.7. HMBC Deneyi: İki ve Üç Bağ Üzerinden Proton ve Karbon Etkileşmelerinin Korelasyonu	447
4.8. NOESY ve ROESY Spektroskopisi: Uzak Üzerinden Protonlar Arası Etkileşmelerin Korelasyonu	460
4.9. ^{13}C - ^{13}C Korelasyonu: INADEQUATE Deneyi	466
Referanslar	470

5. BÖLÜM

YAPISI BİLİNMEYEN BİLEŞİKLERİN ANALİZİ

Yapısı Bilinmeyen Bileşiklerin Analizi	471
--	-----

6. BÖLÜM

FLOR NMR SPEKTROSKOPİSİ

6.1. ^1H , ^{13}C ve ^{19}F Çekirdeklerinin Karşılaştırılması	484
6.2. ^{19}F Çekirdeklerinin Kimyasal Kayma Değerleri	484
6.3. ^{19}F Çekirdekleri ile ^1H çekirdekleri Arasındaki Etkileşme Sabitleri	486
6.4. ^{19}F Çekirdekleri ile ^{13}C çekirdekleri Arasındaki Etkileşme Sabitleri	490
6.5. ^{19}F Çekirdekleri Arasındaki Etkileşme Sabitleri	494
Referanslar	496

7. BÖLÜM

FOSFOR NMR SPEKTROSKOPİSİ

7.1. ^1H , ^{13}C ve ^{31}P Çekirdeklerinin Karşılaştırılması	498
7.2. ^{31}P Çekirdeklerinin Kimyasal Kayma Değerleri	498
7.3. ^{31}P Çekirdekleri ile ^1H Çekirdekleri Arasındaki Etkileşme Sabitleri	502
7.4. ^{31}P Çekirdekleri ile ^{13}C Çekirdekleri Arasındaki Etkileşme Sabitleri	503
7.5. ^{31}P Çekirdekleri Arasındaki Etkileşme Sabitleri	504
Referanslar	505

8. BÖLÜM

ÇÖZÜMLER

1.4.3. Bölüm	507
1.6.3. Bölüm	509
1.10.1. Bölüm	511
1.10.2. Bölüm	511
1.10.3. Bölüm	513
1.10.4. Bölüm	515

DİZİN

A

A₂ spin sistemi 184
A₂B₂ spin sistemi 213
görünüm 213
A₂X₂ spin sistemi 213
görünüm 213
A₃ spin sistemi 203
AA'BB' sistemi
215,218,219,220,221
simetri 217
teorik spektrumlar 218
AA'XX' sistemi 215
AB spin sistemi 185
analiz 187
asimetrik merkez etkisi 197
çatı etkisi 187
molekül geometrisi 195
AB₂ spin sistemi 203
analiz 206
teorik hesaplama 205
ABC sistemi 209
ABX spin sistemi 209
analiz 209
teorik hesaplama 211
AX spin sistemi 185
AX₂ spin sistemi 203
açısal moment 12,13,17
kuantalı 17
ağır atom etkisi 316,341
akrilonitril 182
alan tarama yöntemi 21,26
aldehitler 71,349
¹³C kimyasal kayma 349
¹H kimyasal kayma 72
alıştırmalar 93,167,242
alilik spin-spin etkileşmesi 146

alkanlar 45,322
alkenler 70
¹³C kimyasal kayma 332
¹H kimyasal kayma 71
hesaplama 332
alkil halojenürler 45
alkoller 47
kimyasal kayma 47
allenler 338
amonyum tuzları 50
anisol 6,63,318
antiaromatik bileşikler 58
antiperdeleme 30
antiperdeleme bölgesi 52,70
alkenler 70
alkinler 86
aromatlar 52
karbonil grupları 72
antrasen 56
anulen
[4] 58
[6] 52
[8] 57,58
[10] 54
¹³C kayma 314
[12] 58,60
[14] 56
[16] 60
[18] 57,58
APT spektrumları 294,371,382
1-asetilsikloheptatrien 371
ketoaldehit 390
mentol 390
aromatik bileşikler 50,339
kimyasal kayma 53,60,339
bifenilen 143,307
elektron yoğunluğu 61

naftalin 143
süstitüe aromatlara 60
aromatik halka akımı 51
asetilbenzen 421
asetil 3,4-dihidronaftalenon 476
¹H NMR spektrumu 477
¹³C NMR spektrumu 478
DEPT spektrumu 478
HMQC spektrumu 479
COSY spektrumu 480
HMBC spektrumu 481
asetilen 83,84
manyetik anizotropi 82
kimyasal kayma 83,84
1-asetilsikloheptatrien 371,377,471
¹H NMR spektrumu 471
¹³C NMR spektrumu 472
DEPT spektrumu 473
HMQC spektrumu 473
COSY spektrumu 475
HMBC spektrumu 475
asetofenon 61,368
asimetrik merkezler 197
aspartam 202
¹H NMR spektrumu 202
atom çekirdeği 11
enerjisi 12
manyetik alanda davranışı 15
manyetik kuantum sayısı 15
hidrojenin 15
döteryumun 16
silisyumun 16
manyetik özellik 11
manyetik moment 12
spin kuantum sayısı 16
azulen 58

B

Bağ anizotropisi
 π -bağ derecesi 142
 bekleme süresi 291
 benzen
 ^{13}C kimyasal kayma 314
 etkileşme sabiti 141
 kimyasal kayma hesaplanması 66
 moleküler orbitalleri 59
 NMR spektrumu 53
 UV spektrumu 2
p-benzokinon 185
 bifenilen 143
 etkileşme sabitleri 143
 bifenilendion 235
 birinci derece spektrumlar 22,120,182
syn-bismetano[14]anulen
 Boltzmann dağılım yasası 22,298
 Boltzmann sabiti 22
 bromobenzosikloheptatrien 203
 ^1H NMR spektrumu
 bromoeten 140
 ^1H NMR spektrumu 140
 bütadien 2
 UV değeri 3
 1-büten 4
 2-bütenal 165

C

^{13}C - ^{13}C korelasyonu 466
 ^{13}C çekirdeği
 doğada dağılım 268
 enerji seviyeleri 268,269
 jromantetik sabiti 268
 CDCl_3 365
 CHCl_3 2D spektrumu 411
 CHF_3 45
 ^{13}C işaretleme 272
 ^{13}C NMR spektroskopisi 267
 gelişimi 267
 hassasiyet artırılması 270
 manyetik alan şiddeti 271
 sıcaklık etkisi 270
 kimyasal kayma 311
 aldehitler 349
 alkanlar 322
 formülü 322
 kaydırma
 parametreleri 323
 sterik parametreler 323
 süstitüe alkanlar 325
 alkenler 332
 kaydırma
 parametreleri 333

sterik parametreler 333
 alkinler 337
 allenler 338
 anhidritler 352
 aromatik bileşikler 339
 kaydırma
 parametreleri 340
 esterler 351
 karboksilik asitler 350
 karbonil bileşikler 346
 sikloalkanlar 328
 süstitüe alkanlar 293
 ölçme teknikleri 292
 aralıklı geniş bantlı
 inversion-geridönüşüm 309
 kantitatif karbon ölçümü 308
 ^{13}C NMR spektrumları
 anisol 344
 benzaldehit 344
 bifenilen 307
 dimetil
 sikloheptatriendikarboksilat 288,289
 etil asetat 293,294
 etil benzoate 308
 hekzan 325
 homobenzobarrelen 310
 mentol 390
 metoksisiklopenten 318,332
 naftalin 346
 oktanol
 siklopenten 318
 siklopentenon 318,332
 tetrabromür 293,294
 toluene 344
 COSY deneyi 409,419
 asetilbenzen COSY 421
 bromotetrahidropentalendion COSY 428
n-bütanol COSY 431
 dimetoksiokten COSY 433
 etilbenzene COSY 419
 etilhomobenzonorbormadien COSY 429
 etildihidroindenon COSY 423
 ketoendoperoksit COSY 424
 oksazol COSY 427
 peptit dimeri COSY 437
 sakkaroz COSY 435
 CPMG yöntemi 381
 CW continous wave 282
 CW yöntemi 282
Ç
 Çapraz pik 412

çatı etkisi 186
 çekirdeklerin enerji seviyeleri 17,22
 kuantalı 17
 çekirdek spini 12
 çift bağlar 70
 kimyasal kayma 76
 çift bağ ekivalenti 93
 çift rezonans olayı 226
 çizgi şiddeti dağılımı 118
 çoklu puls deneyleri 371
 çözücüler 37,38

D

Değişken dalga yöntemi 21,272,282
 DEPT ölçümü 294, 403
 bisepoksit 403
 mentol spektrumu 406
 tetrahidroazulen spektrumu 407
 tetraasetat spektrumu 408
 dibromür bileşiği 201,302
 ^1H NMR spektrumu 201
 1,2,-dietoksietan 200
 3,4-dihidronaftalenon
 diyagonal pik 412
 diyamanyetik anizotropi 51
 diyamanyetik halka akımı 50,51
 diyamanyetik kayma 41
 diastereotop proton 200,
 dihedral açısı 135,146
 dihidroazulenon 235
 dimetilformamid 295
 2,3-dimetilpentan 324
 dinamik denge 238
 temel teoriler 239
 dinamik NMR spektroskopisi 238
 dinamik nükleer polarizasyon 298
 dinamik prosesler 7
 dipolar durulma 280
 döner koordinatlar 276
 dörtlü spin sistemleri 213
 döteryum 48,134
 enerji seviyeleri 19
 manyetik alanda davranışı 19
 proton ile etkileşmesi 122,134
 çizgi şiddetleri 122
 spin kuantum sayısı 18
 dublet 108
 analizi 109
 oluşumu
 dubletin dubleti 155
 analizi 156
 dubletin dubletin kuarteti 161
 dubletin dubletin tripleti 160
 dubletin kuarteti 158
 dubletin tripleti 156

analizi 157
 durulma olayı 23, 270
 çift kuantum geçişi W_2 298
 dipolar geçişi 278,280
 CHCl_3 ölçümü 374
 kuadropolar 281
 paramanyetik 280
 sıfır kuantum geçişi W_0 298
 spin-spin durulması
 23,24,278,376
 zamanı T_2 278
 ölçümü 380
 spin-örgü durulması T_1
 23,24,278
 zamanı T_1 279
 ölçümü 372,3756
 1-asetilsikloheptatrien 37
 bisikloendoperoksit 376
 spin rotasyon durulması 281
 durulma zamanı 23,24
 mekanizması 280

E

Elektrik alan etkisi 341
 elemental analiz 1,4
 enantiyotop proton 17,199
 enerji formülü
 enerji seviyeleri 20
 dağılımı 20
 enerji dağılım formülü 22
 esterler 48,72
 kimyasal kayma 48,72
 etan 7
 konformasyon izomerleri 7
 eterler 48
 aromatik eterler 48
 kimyasal kayma 48
 etil asetat 106
 ^1H NMR spektrumu 106
 etilbenzen
 ^1H H NMR spektrumu 419
 COSY spektrumu 420
 etil benzoat
 ^{13}C NMR spektrumu 5, 308
 ^1H NMR spektrumu 5
 UV spektrumu 2
 etil dibromodihidrosinamat 138
 ^1H NMR spektrumu 138
 etil izovalerat 119
 ^1H NMR spektrumu 119
 etil 3-kloropropanoat 117
 ^1H NMR spektrumu 117
 etil *m*-nitrobenzoat 2
 etkileşme sabiti 110
 alilik etkileşme 126
 çift bağlarda etkileşme 140

geminal etkileşme 126
 homoalilik etkileşme 127
 meta etkileşmesi 126
 sıcaklık etkisi 152
 uzun mesafe etkileşmeler 126
 visinal etkileşme 126
 Eyring denklemi 239

F

Fenantren 56
 FID-sinyali 285
 flor NMR spektroskopisi 483
 ^{19}F , ^1H , ^{13}C çekirdeklerinin
 karşılaştırılması 484
 ^{19}F kimyasal kayma 484
 ^{19}F - ^1H etkileşmesi 486
 ^{19}F , ^1H , ^{13}C çekirdeklerinin
 karşılaştırılması 484
 ^{19}F - ^{13}C etkileşmesi 490
 ^{19}F - ^{19}F etkileşmesi 494
 florobenzen ^{13}C NMR 492
 florobenzen ^1H NMR 489
 1-florobütan ^{13}C NMR 494
 1-floro2,4,-diflorobenzen ^{13}C
 NMR 493
 fosfor NMR spektroskopisi 497
 ^{31}P , ^1H , ^{13}C çekirdeklerinin
 karşılaştırılması 498
 ^{31}P kimyasal kayma 498
 ^{31}P - ^1H , etkileşmeleri 502
 ^{31}P - ^{13}C , etkileşmeleri 503
 izopentil difosfat ^1H NMR 503
 izopentil difosfat ^{13}C NMR 504
 izopentil difosfat ^{31}P NMR 505
 ^{31}P - ^{31}P , etkileşmeleri 504
 fourier transformasyon yöntemi
 21,272,278,286
 frekans tarama yöntemi 21

G

Gated decoupling 305
 γ -gauch etki, 317,319
 γ -gauch sterik etki 319
anti- γ -gauch etki 321
syn- γ -gauch etki 321
 gelişme evresi 373
 geminal spin-spin etkileşmesi
 124,126,127
 etkileyen faktörler 124
 π -bağlarının etkisi 131
 elektronegatif etki 130
 halka büyüklüğü 128
 hibritleşme 127
 protonlar arasındaki açı 128
 ölçülmesi 134
 valans açısı 128

geniş bantlı ışınlama 293
 gürlüğü 272

H

Halka akımı 51
 aromatik 51
 siklopropan 89
 1-halopentan ^{13}C NMR 316
 hazırlık evresi 373
 Heisenberg belirsizlik ilkesi 24
 hekzen 333
 HETCOR spektrumu 409,439
 benzohomonorbornadien
 443ketoendoperoksit
 440 *n*-propil asetat 448
 asetilbenzene 455
 ipsenol 457
 heteronükleer korelasyon 439
 heterosiklik bileşikler 69,352
 elektronca zengin 354
 elektronca fakir 354
 ^1H kayma değerleri 69
 ^{13}C kayma değerleri 352
 doymuş sistemler 352
 doymamış sistemler 353
 H-H etkileşme mekanizması 123
 hidrokarbonlar
 ^{13}C kayma değerleri 322
 ^1H kayma değerleri 88
 hidroksiketon
 ^{13}C NMR spektrumu 288
 FID sinyali 288
 HMBC deneyi 409,447
 bromotetrahidropentalendion
 458,459
 bromonaftiridin 453
 dimetilindanon 451
n-propil asetat 449
 HMQC 409,439
 asetilbenzen 455
 etildihidroindenon 442
 siklooktantetrol 441
 HOHAHA 430
 HRMS 1,3
 HSQC 409,439
 peptit dimeri 446456
 ipsenol
 HSQC-TOCSY 410,444
n-bütanol 445
 peptit dimeri 446
 homoalilik etkileşme 147
 halkalı sistemlerde 148
 homonükleer korelasyon 419
 Hund yasası 59
 Hückel kuralı 54,58

I

INADEQUATE ölçümü 410,466
 1D-INADEQUATE 466
 puls sıralaması 467
 2D-INADEQUATE 410,466
 mentol spektrumu 468
 INEPT 382,398
 odaklanmış INEP 400
 IR spektroskopisi 1
 ışınlama 226

İ

iki boyutlu NMR spektroskopisi 409
 2D NMR spektroskopisi 409
 temel teori 415
 ikili spin sistemleri 184
 ikinci derece spektrumlar
 22,120,182
 integrasyon 25
 invers gated decoupling 308
 inversion-recovery 372
 inverziyon-geridönüşüm yöntemi 372
 ipsenol 456
 HMQC spektrumu 456
 HMBC spektrumu 457

J

Jahn-Teller teoremi 59
¹J_{CH} etkileşme 356
 alkil halojenürler 357
 heterosiklik bileşikler 359
 hidrokarbonlar 358
²J_{CH} geminal etkileşme 365
³J_{CH} visinal etkileşme 367
 jirmanyetik sabiti 12
 j-modulasyon 382

K

Kantitatif karbon ölçümü 308
 karbon-döteryum etkileşmesi 364
 karbon-hidrojen tek bağı 85
 manyetik anizotropi 85
 karbon-karbon çift bağı 70
 diyamanyetik anizotropi
 70,76,82,86
 kimyasal kayma değerleri
 77,332
 karbon-karbon tek bağı 85
 manyetik anizotropi 85,86
 karbonil bileşikler 346
 doymamış karboniller 347
 ¹³C kimyasal kayma
 değerleri 346
 ¹H kimyasal kayma
 değerleri 70,75,76

halkalı sistemler 74
 karbon-oksijen çift bağı 70
 diyamanyetik anizotropi 70
 karışım analizi 263
 Karplus eğrisi 136
 Karplus formülü 137
 Karplus-Pople formülü 313
 kaydırma değerleri
 ¹³C NMR
 alkanlar 87
 alkenler 333,337
 aromatik bileşikler 340
 norbornan sistemi 331
 sikloalkanlar 329,330
 ¹H NMR
 alkanlar 80
 aromatik bileşikler 65,66
 süstitüe metan 87
 kaydırıcı reaktifler 231,232
 (Eu(dpm)₃) 232
 Eu(facam)₃ 237
 Eu(fod)₃ 232
 Eu(hfbc)₃ 237
 feniletilamin 237
 kaydırma formülü 233
 kayıt devresi
 keto-enol tautomerisi 349
 ketonlar 72
 ¹³C kimyasal kayma 346
 ¹H kimyasal kayma 72
 kimyasal kayma 28,32,311,322
 ¹³C kayma değerleri 315,346
 çözücü etkisi 91
 elektron yoğunluğu
 41,46,47,85,314
 etkileyen faktörler 39,315
 ağır atom etkisi, 316,341
 γ-gauch etki 319
 hibritleşme 50,314
 indüktif etki 47,315
 mezomerik etki 317
 sterik etki
 fonksiyonel gruplar 40
 komşu grup etkisi 50
 konsantrasyon etkisi 91
 sıcaklık etkisi 91
 van der Waals itmesi
 kloroakrilonitril 196
 2-kloroasetat 185
 3-kloro-2-bütanon 113
 ¹H NMR spektrumu 113
 2-kloro-1-feniletan-1-ol 210
 koalesenz sıcaklığı 240
 komşu proton 120
 konfigürasyon izomerleri 7
 konformasyon 6,7

analizi 7
 anti-periplanar 7
 syn-periplanar 7
 konstitüsyon 6
 konstitüsyon izomerleri 6
 kontur spektrum 411
 koordinatlar 276
 döner 276
 sabit 276
 korelasyon zamanları 280
 krotonaldehit 227
 ¹H NMR spektrumu 227
 kuadropolar durulma 281
 kuartet 114
 analizi 115
 çizgi şiddetleri 115
 oluşumu 114
 kütle spektrometresi 1,3

L

Lantanit bileşikler 232
 larmor frekansı 274
 formülü 274
 Lenz yasası 29,41,311
 longitudinal miknatıslanma 275
 longitudinal durulma 298,374

M

Manyetik alan
 düşük alan 31
 homojenliği 27
 lokal manyetik alan 28,31
 sekonder manyetik alan
 29,30,31
 şiddeti 20,21
 yüksek alan 31
 manyetik anizotropi 55,70
 manyetik dipol 13
 enerjisi 13
 farklı enerji seviyeleri 13,18
 manyetik kuantum sayısı 13
 manyetik moment 12,13
 bileşenleri 274
 kuantalı 17
 meta spin-spin etkileşmesi
 metan
 kimyasal kayma 322
 metanhaloijenürler 316
 metano[10]anulen 54
 metilennorbornadien 335
 metilensiklopropen 78
 metil halojenürler 43,44
 4-metiloksetan-2-on 190
 2-metilprolidin 8
 3-metilprolidin 8

o-metoksiasetofenon 6
p-metoksiasetofenon 6
 mıknaıtis
 dođal mıknaıtıslar 27,271
 elektromıknaıtis 271
 süperiletken mıknaıtıslar 271
 mıknaıtıslanma 274
 longitudinal 275,278
 transversal 278
 molekül ağırlığı 3
 moleküller arasında ayırım 245
 monokromatik dalga 284
 MRI görüntüleme 10
 MS spektrometresi 1

N

NMR spektroskopisi 1,4,21
 çalışma prensibi 26
 FT-NMR cihazı 26
 gelişmesi 9
 hassasiyeti 22
 klasik NMR cihazı 27,272
 NMR spektrumları (¹H)
 anilin 63
 anisol 63,318
 [10]anulen 54
 antrasen 53
 asetaldehit 71
 asetofenon 62
 aseton-d₆ 123
 benzalaldehit 71
 benzen 53,63
 benzohomonorbornadien 442
 bifenilen-2,3-dion 235
 bisepoksit 192
 bromobenzosikloheptatrien 161
 1-bromo-2,4-diflorobenzen 488
 1-bromo-2,4-diklorobenzen 487
 1-bromo-4-florobenzen 489
 1-bromo-4-klorobenzen 489
 1-bromopropan 118,119,155
 2-bromopropan 118,119,155
 bromotetrahidropentalendion 428
 bütanol 233, 431
 dietil eter 116
 dietil malonat 106
 dihidroindenon 222,223
 o-diklorobenzen 215
 o-diklorofenol 208
 dimetilasetamid 241
 dimetilindanon 450
 4-etilbenzalaldehit 26
 etil asetat 106
 etil benzoat 429
 etildihidroindenon 422

etil 3-kloropropanoat 117
 fenil asetilen 84
 1-florobütan 490
 furan 164
 furan-2-karbaldehit 163
 indanon 224
 3-kloro-2-bütanon 113
 kromanon 223,224
 krotonaldehit
 kuadrosiklan 190
 metil asetat 29
 4-metoksi-3-büten-2-on 108
 4-metoksi-3-bütan-2-on 116,117
 naftalin 53
 trisüstitüe naftalin 463
p-nitroanisol 66
 nitrobenzen 62,318,341
N,N-dimetilformamid 295
 2,4-pentandion 74
 propargil
 asetat 84
 sikloheksadien endoperoksit 221,222
 sikloheptatrien 77,144
 tribromobenzen 149
 tribromonorbornan 304,320
 tribromür 152
 1,1,2-trikloroetan
 naftalin
 etkileşme sabitleri 143
 ¹³C NMR spektrumu 346
 ¹H NMR spektrumu 53
 Newmann projeksiyonu
 NMR tüpü 37
 NOE 295
 NOE-Difference spektrumu 302
 NOESY spektrumu 410,460
 vanilin 461
 trisüstitüe naftalin 464
 kaliksaren 465
 norbornadien 197
 norbornan 6,321,330
 norkaradien 91
 sıcaklık etkisi 91
 norkaren 7
 norlösün 327
 numune hazırlanması 37,310
 nükleer Overhauser artışı 301
 nükleer Overhauser etki 295
 heteronükleer 297
 homonükleer 296
 negatif NOE 300
 pozitif NOE 300

O

Okuma düzlemi 374

oksazol türevi 426
 olefinler
 diyamanyetik anizotropi
 kimyasal kayma

Ö

Örgü 24
 özdeş protonlar 197

P

Paramanyetik durulma 308
 paramanyetik halka akımı 58
 paramanyetik kayma 41
 paramanyetik tuzlar 231
 [2,2]parasiklofan 133
 para spin-spin etkileşmesi 149
 Pascal üçgeni 118
 peak supression 311
 perdeleme 29,42
 perdeleme bölgesi 52
 aromatlar 52
 çift bağlar 70
 karbon-hidrojen bağı 85
 üçlü bağlar 82
 perdeleme sabiti 31
 çözücü etkisi 31,32,311
 diyamanyetik perdeleme 32,311,317
 komşu grup etkisi 32,311
 paramanyetik perdeleme 32,311
 formülü 32,313
 propil akrilat 411
 ¹H NMR spektrumu 411
 COSY spektrumu 412,413
 HETCOR spektrumu 414
 pik 33
 genişliği
 yerlerinin belirlenmesi
 Plank sabiti 13
 popülasyon 22
 manyetik alan etkisi 22
 sıcaklık etkisi 223
 popülasyon transferi 391
 selektif popülasyon transferi 391
 selektif popülasyon
 inverziyonu 391
 presesyon hareketi 24,273
 proton sayılarının belirlenmesi 243
 puls genişliği 282
 puls NMR 282,286
 puls spektroskopisi 282
 π-pulsu, 90° puls 284,372
 π/2 puls, 180° puls 284,372
 oluşum süresi 282
 yumuşak puls 393

R

Rezonans 19,273
 rezonans bölgeleri 36
 protonların 39
 rezonans koşulu 30
 rezonans olayı 11,19,273,276
 RF alanı 275
 ROESY 410,460
 röleksasyon 23,278
 Röntgen spektroskopisi 1

S

Safsızlık pikleri 122
 SEFT ölçümü 382
 sekonder manyetik alan 51
 selektif ışınlama 393
 selektif popülasyon inverziyonu 393
 selektif spin transferi 393
 serbest aktivasyon enerjisi 239
 siklobütadien 58,59
 moleküler orbitalleri 59
 siklobüten 8
 siklofan 55
 sikloheksadien ¹³C kayma 312
 sikloheksan 135,324
 aksiyal-aksiyal 7,135,139
 aksiyal-ekvatoryal 139
 dinamik denge 91,329
 ekvatoryal-ekvatoryal 7,135,139
 kimyasal kayma 87,153,329
 konformasyon 7,153
 manyetik anizotropi 87
 spin-spin etkileşmesi,139
 sikloheksenon 76
 sikloheptatrien 77,144
 etkilşeme sabitleri 144,153
 valans izomeri 91
 siklooktatetraen 57
 ¹³C kimyasal kayma 314
 dianyonu 46,57
 siklopentan 139
 etkileşme sabitleri 139
 siklopentenon 76,191
 siklopropan 88,139
 halka akımı 89
 etkileşme sabitleri 139
 siklopropen
 siklopropil katyonu 46
 sinyal/gürültü oranı 272,288
 Solomon şeması 297
 spektrum toplama 272
 SPI 390
 spin çevrilmesi 20

spin-eko olayı 379
 CH- grubu 382
 CH₂-grubu 386
 CH₃-grubu 386
 J-modulasyon 382
 spin-spin etkileşmesi 106,109,356
 ¹³C NMR için
 tek bağ üzerinden 356
 döteryum ile 364
 gerilimli halkalar 358
 hesaplanması 360
 heterosiklik bileşikler 359
 hibridizasyon 357
 indüktif etki 357
 süstitüent değerleri 360
 iki bağ üzerinden 365
 üç bağ üzerinden 367
 ¹H NMR için
 tek bağ üzerinden 124
 iki bağ üzerinden 124
 üç bağ üzerinden 125
 mekanizması 123
 sıcaklık etkisi
 spin kuantum sayısı 13,15
 çift-çift çekirdekler 13
 çift-tek çekirdekler 14
 tek-çift çekirdekler 14
 tek-tek çekirdekler 14
 spin örgü durulması 23,24,278
 ölçümü 380
 spin rotasyon durulması 281
 spin-spin durulması 23,24,278
 SPT 391
 sterik düzeltme parametreleri 322
 sterik etkiler 322
 suberon 64
 super conducting coil 271
 süksinik asit 8
T
 T₁ 279
 T₂ 278
 taşıyıcı frekans 282
 tetrametilsilan 33
 özellikleri 33
 rezonans yeri 33
 TMS 33
 TOCSY spektrumları 409,430
 n-bütanol TOCSY 432
 dimetoksiokten TOCSY 429
 sakkaroz TOCSY 436
 peptit dimeri TOCSY 438
 transversal durulma 378,379
 1,1,2-trikloroetan 110
 triplet 111
 analizi 113

çizgi şiddetleri 111
 oluşumu 111
 triplet (proton-döteryum etkileşmesi) 122
 tropilyum katyonu 46

U

UV-VIS spektroskopisi 1,2
 uydu sinyalleri 292,363
 kloroform 363
 maleik anhidrit 364
 uzun mesafe etkileşmeler 145
 alilik etkileşme 146
 aromatik bileşikler 149
 doymuş halkalı sistemler 151
 homoalilik etkileşme 147
 meta etkileşmesi 149
 para etkileşmesi 149
 zig-zag düzen 150

Ü

Üçlü bağlar 82
 diyamanetik anizotropi 82
 üçlü spin sistemleri 203

V

Valans açısı 141
 van der Waals itmesi 89
 halojen etkisi 90
 naftalinde 89
 rijit sistemlerde 90
 visinal spin-spin etkileşmesi 125,135
 C-H etkileşmesi 367
 H-H etkileşmesi 125,144
 cis-Etkileşme 135
 trans-Etkileşme 135
 etkileyen faktörler 125
 bağ uzunluğu 142
 dihedral açısı 135
 elektronegatiflik 144
 valans açısı 141
 π-bağ derecesi 142

W

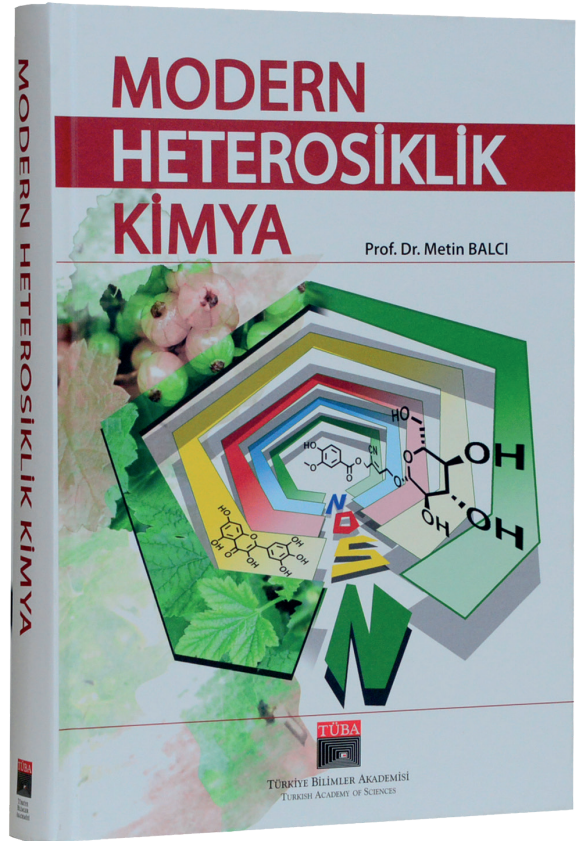
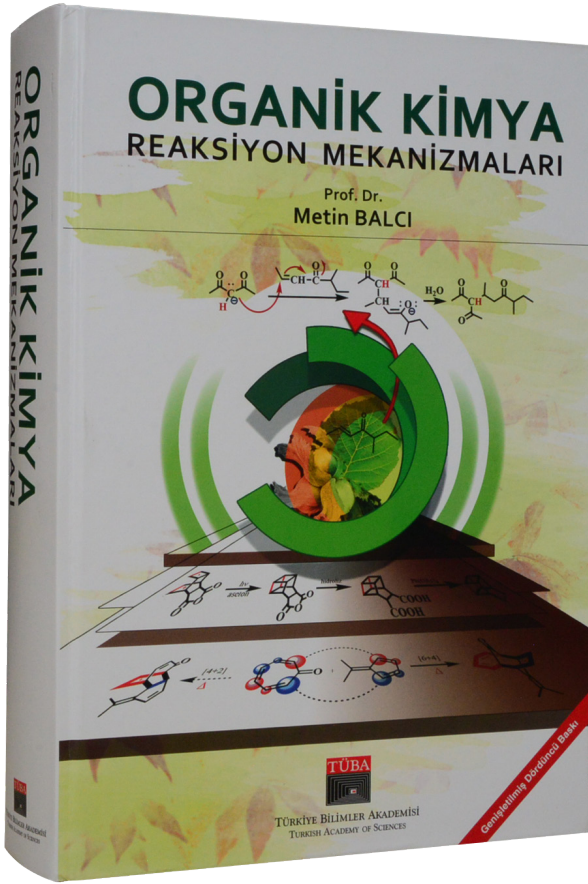
W etkileşmesi 151

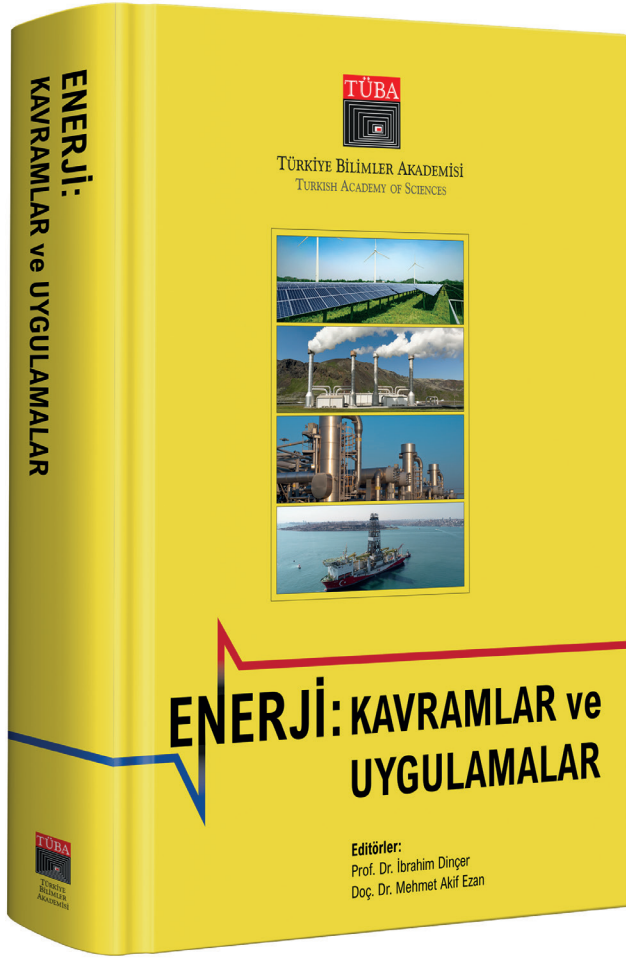
X

X-ışınları cihazı 1,3
 xy-düzlemi 378

Y

Yapı tayini 1,8,247





NÜKLEER MANYETİK REZONANS SPEKTROSKOPİSİ

Bu eser, NMR spektroskopisinin temel ilkeleri ile çeşitli uygulama alanlarına kapsamlı bir giriş sunmaktadır. NMR tekniğini analitik ve sistematik bir yaklaşımla ele alan bu kitap, sade ve anlaşılır anlatımı sayesinde lisans ve lisansüstü düzeyindeki öğrenciler ile araştırmacılar için değerli bir başvuru kaynağı niteliği taşımaktadır. Eser, öğrencilerin NMR öğrenme sürecinde sıklıkla karşılaştıkları kavramsal zorluklara odaklanmakta; kimyasal kayma, etkileşme sabitleri ve spin sistemleri ile bu sistemlerin kuramsal çerçevede değerlendirilme biçimlerine öncelik vermektedir. Bununla birlikte, okuyucuyu NMR spektroskopisinde karşılaşılan karmaşık matematiksel işlemlerden büyük ölçüde uzak tutarak kavramsal anlaşılabilirliği ön planda tutmaktadır.

Kitapta proton ve karbon olmak üzere iki farklı çekirdek türü ayrı bölümler altında ele alınmakta ve ayrıntılı biçimde incelenmektedir. Proton NMR bölümünde, NMR olgusu sadeleştirilmiş modeller aracılığıyla açıklanırken; karbon NMR bölümünde ise daha gerçekçi ve kapsamlı bir yaklaşım benimsenmiştir. Ayrıca, özgün örnekler ve kuramsal hesaplamalar eşliğinde ikinci derece spektrumlar ayrıntılı bir şekilde tartışılmaktadır.

İki boyutlu NMR spektrumlarının oluşum mekanizmalarına ek olarak, APT, COSY, HETCOR, HMQC, HSQC, HMBC, TOCSY, TOCSY-HSQC, NOESY, ROESY ve INADEQUATE gibi ileri düzey ölçüm tekniklerine kapsamlı biçimde yer verilmekte ve bu teknikler örneklerle açıklanmaktadır.

Eserin son bölümleri ise ^{19}F ve ^{31}P NMR spektroskopilerine ayrılmış olup; bu bölümlerde, flor ve fosfor atomu içeren moleküllerin proton ve karbon NMR spektrumlarını ne şekilde değiştirdiğine ilişkin ayrıntılı bilgiler sunulmaktadır.

