



## TANTÁRGYI ADATLAP

<b>Tárgy neve:</b>		<b>Kódja:</b>	
Heteromagok NMR spektroszkópiája		VEMKSI4312H	
Heteronuclear Magnetic Resonance			
<b>Tárgyfelel s oktató:</b>		<b>Tárgyfelel s tanszék:</b>	
dr. Szalontai Gábor		Szilikát- és Anyagmérnöki Tanszék	
<b>Elmélet (óra):</b>		<b>Kredit:</b>	<b>Számonkérés:</b>
2 (/hét)		2	Vizsga

<b>A tárgy oktatója:</b>				
<b>név</b>	<b>kurzus:</b>	<b>min. limit (fő)</b>	<b>max. limit (fő)</b>	<b>nyelv</b>
dr. Szalontai Gábor	Elmélet	5	15	magyar
<b>A tantárgy célkitűzése</b>				
<b>Tantárgy képzési célja:</b>				
Olyan ismeretek nyújtása, amelyek segítségével a hallgató képes a TDK, diploma vagy PhD témájához fontos magokat kiválasztani, azok spektrumának jellegzetességeit kihasználni valamint a spektrumokat értelmezni				



# TANTÁRGYI ADATLAP

## Tantárgy tematikája:

Általános elméleti rész és az alkalmazott vizsgálati módszerek  
 Kölcsönhatások az anyagokban mágneses momentummal rendelkező magok között  
 Kémiai eltolódás (elmélet, effektusok). A heteromagok esetén jelentkező általános hatások és speciális hatások.  
 A skaláris spin-spin csatolások elméleti alapjai.  
 A relaxáció jelensége (spin-rács és spin-spin), T1 mérése, mechanizmusok: dipoláris, kvadrupoláris, spin rotációs, skaláris csatolás I és II, kémiai árnyékolási anizotrópia.  
 Dinamikus NMR (a jelenség és alkalmazási példák). Csere két azonos energiájú hely között, csere két eltérő energiájú hely között.  
 Dipoláris ( $I = 1/2$ ) magok vizsgálata  
 $^1\text{H}$  NMR: (klasszikus fémhidridek vizsgálata),  $^{15}\text{N}$ ,  $^{14}\text{N}$  NMR: (méréstechnikai problémák),  $^{19}\text{F}$  NMR,  $^{29}\text{Si}$  NMR.  
 Skaláris spin-spin csatolások heteromagok között: Példák: klaszterek: foszfido csoportok terminális és híd térhelyzete  
 P(III) vegyületek: foszfor-szén csatolási állandók függése a szubsztituensek elektronegativitásától és térhelyzetétől  
 Több aszimmetriacentrumot tartalmazó ditercier-foszfinok vizsgálata,  $n\text{J}(\text{P}\dots\text{P})$  ( $n = 5-6$ ) csatolás téren át dioxafoszforinán származékokban.  
 Átmenetifém komplexek: az egykötéses fém-foszfor, és a kétkötéses P-M-P csatolási állandókból nyerhető térszerkezeti adatok. Egykötéses fém-foszfor csatolási állandó vs. Pt komplexek térszerkezete, cisz vs. transz szubsztituens hatás.  
 A két- és háromkötéses csatolások térszerkezetfüggése:  
 $^{31}\text{P}$  NMR: a kelátgyűrű méretének hatása a kémiai eltolódásra és a P...P csatolások mértékére.  
 Magasabbrendű spinrendszerek három vagy négy foszforatomot tartalmazó komplexek esetében, a kétkötéses csatolások előjelváltása a P-Pt-P szögtől függően. Izotopomerek NMR spektrumai: (kétmagvú Pt-Pt foszfin komplexek). Az optikai tisztaság meghatározásának lehetőségei folyadékfázisban.  
 Diasztereomerképzés királis származékokkal.  
 A spin-rács relaxációs idők felhasználása a szerkezetazonosításban. Szabad ligandum vs. koordinált foszfin T1 idei.  
 $^{57}\text{Fe}$  NMR,  $^{77}\text{Se}$  NMR,  $^{103}\text{Rh}$  NMR,  $^{119}\text{Sn}$  NMR,  $^{195}\text{Pt}$  NMR:  
 Az árnyékolási anizotrópia hatása a relaxációs időkre, Pt-biszfoszfin komplexek spektrumai.  
 Kvadrupól magok ( $I > 1/2$ ) vizsgálata  
 Várható effektusok, a legalkalmasabb izotóp kiválasztása, a kvadrupól magok közvetlen mérésének lehetőségei és alkalmazásai, spektrumaik információtartalma.  
 $^2\text{H}$  NMR,  $^{10,11}\text{B}$  NMR,  $^{14}\text{N}$  NMR: az alkilimido csoport  $^{14}\text{N}$  NMR vizsgálata oktaéderes és tetraéderes W, Cr és Mo komplexekben.  $^{17}\text{O}$  NMR: CO, NO jelek hárommagvú klaszterekben.  $^{35}\text{Cl}$ ,  $^{59}\text{Co}$ ,  $^{63}\text{Cu}$  NMR: a mag körüli szimmetria hatása a  $^{59}\text{Co}$  jelek relaxációjára.  
 A kvadrupólus magok hatása az  $1/2$ -es spinű magok ( $^{31}\text{P}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{119}\text{Sn}$ ) spektrumaira.  
 $^{59}\text{Co}$ - $^{31}\text{P}$ ,  $^{59}\text{Co}$ - $^{13}\text{C}$  csatolások meghatározási lehetőségei. A  $^{13}\text{P}/^{59}\text{Co}$  magpár viselkedésére.

## Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:

Szalontai Gábor: Heteronukleáris NMR Spektroszkópia (CD jegyzet, 2004)  
 Válogatott fejezetek a fémorganikus kémiából. Veszprém, 1996 (jegyzet).  
 Brevard and Granger: Handbook of High Resolution Multinuclear NMR, Wiley, Chichester, 1981.