



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:	
NMR spektroszkópia		VEMKSI4312S	
NMR spectroscopy			
Tárgyfelel s oktató:		Tárgyfelel s tanszék:	
dr. Szalontai Gábor		Szilikát- és Anyagmérnöki Tanszék	
Elmélet (óra):		Kredit:	Számonkérés:
2 (/hét)		2	Vizsga

A tárgy oktatója:				
név	kurzus:	min. limit (fő)	max. limit (fő)	nyelv
dr. Szalontai Gábor	Elmélet	5	15	magyar

A tantárgy célkitűzése

Tantárgy képzési célja:

Olyan ismeretek nyújtása, amelyek segítségével az alapjelenség ismeretén túl a hallgató képes eligazodni a módszerek között, ki tudja választani a feladata (diákköri vagy diplomamunka esetleg doktori értekezés) szempontjából megfelelőt

Tantárgy tematikája:

Bevezetés. Alapjelenség: a magspinek, a mágneses- és szögmomentumok, a spinkvantumszám.

A magspinek és egyéb di- és kvadrupólok kölcsönhatásai oldat- és szilárdfázisban.

Gerjesztési módok (puha és kemény impulzusok), az impulzusüzemű FT eljárás.

Az akvizíció, a jel fázisa, kvadratúr detektálási mód, a jel súlyzása.

A relaxáció jelensége, mérési eljárások. Relaxációs mechanizmusok, a spin echo jelenség.

Dinamikus NMR, csere spektroszkópia

Kölcsönhatások a téren át: mag Overhauser hatás (NOE), egyensúlyi és tranzien NOE, szerves és fémorganikus kémiai alkalmazások.

A kötések által közvetített skaláris csatolások értelmezése, használata, első és másodrendű spinrendszerek.

Érzékenységnövelés és spektrumszerkesztés polarizációátvitellel.

Kétdimenziós eljárások: homonukleáris kémiai eltolódás korrelációk (COSY).

Heteronukleáris kémiai eltolódás korrelációk (HETCOR, FLOCK).

J-spektroszkópia (APT, Spin-echo, HOM2DJ).

Gradiens segített spektroszkópia: HSQC és HMQC eljárások

Esettanulmány folyadékfázisú vizsgálatokra: cedrenol.

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:

Szalontai Gábor: Egy- és kétdimenziós NMR eljárások a kémiai szerkezetkutatásban, Veszprém, 2003 (jegyzet CD-n)