



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:	
Heteromagok NMR spektroszkópiája		VEMKSI4312H	
Heteronuclear Magnetic Resonance			
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 típusa	kurzus kódja	nyelv
dr. Szalontai Gábor	Elmélet	10	magyar

Tantárgy képzési célja:
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
 ^1H NMR: (klasszikus fémhidridek vizsgálata), ^{15}N , ^{14}N NMR: (méréstechnikai problémák), ^{19}F NMR, ^{29}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-foszfínok 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}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}Fe NMR, ^{77}Se NMR, ^{103}Rh NMR, ^{119}Sn NMR, ^{195}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.
 ^2H NMR, $^{10,11}\text{B}$ NMR, ^{14}N NMR: az alkilimido csoport ^{14}N NMR vizsgálata oktaéderes és tetraéderes W, Cr és Mo komplexekben. ^{17}O NMR: CO, NO jelek hárommagvú klaszterekben. ^{35}Cl , ^{59}Co , ^{63}Cu NMR: a mag körüli szimmetria hatása a ^{59}Co jelek relaxációjára.
 A kvadrupólus magok hatása az $1/2$ -es spinű magok (^{31}P , ^{13}C , ^{119}Sn) spektrumaira.
 ^{59}Co - ^{31}P , ^{59}Co - ^{13}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.