



Tárgytematika

Félév:	2009/10/1
Tárgynév:	Heteromagok NMR spektroszkópiája
Tárgykód:	VEMKSI4312H
Felelős szervezet neve:	Anyagmérnöki Intézet (+NMR Laboratórium)
Felelős szervezet kódja:	MKSI
Tárgyfelelős neve:	dr. Szalontai Gábor

Oktatás 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

Tantárgy tartalma:

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 vizsgálatai), ^{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-foszfinok vizsgálata, $nJ(\text{P}\dots\text{P})$ ($n = 5-6$) 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 idek. ^{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}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.



Tárgytematika

Félév:	2009/10/1
Tárgynév:	Heteromagok NMR spektroszkópiája
Tárgykód:	VEMKSI4312H
Felelős szervezet neve:	Anyagmérnöki Intézet (+NMR Laboratórium)
Felelős szervezet kódja:	MKSI
Tárgyfelelős neve:	dr. Szalontai Gábor

Számonkérési és értékelési rendszere:

Kötelező és ajánlott 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.