



Tárgytematika

Félév:	2012/13/1
Tárgynév:	NMR spektroszkópia
Tárgykód:	VEMKSI4312S
Felelős szervezet neve:	Anyagmérnöki Intézet (+NMR Laboratórium)
Felelős szervezet kódja:	MKSI
Tárgyfelelős neve:	dr. Szalontai Gábor

Oktatás 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 tartalma:

Bevezetés. Alapjelenség: a magspin, a mágneses- és szögmomentumok, a spinkvantumszám. A magspin 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 súlyozása. 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 tranziens 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.

Számonkérési és értékelési rendszere:

Kötelező és ajánlott irodalom:

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