

A tantárgy neve:	magyarul:	Spektroszkópiai módszerek I.	Kódja:	TTKBE0503
	angolul:	Spectroscopic methods I.		

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>Az NMR spektroszkópia története, alapelve. Az atommagok impulzusmomentuma és mágneses sajátosságai. NMR aktív magok.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri az atommagok mágneses tulajdonságait, az NMR aktív magokat.</p>
2. hét	<p>A mágneses mező hatása (Zeeman-kölcsönhatás), az NMR kiválasztási szabály, a rezonanciafeltétel, a Larmor-precesszió. A Zeeman-szintek betöltöttsége, a makroszkópikus mágnesezettség.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a mágneses mező hatását az atommagokra, az NMR kiválasztási szabályt. Ismeri a rezonanciafeltételt, a Larmor-precessziót, valamint a makroszkópikus mágnesezettség fogalmát.</p>
3. hét	<p>A kémiai árnyékolás, a kémiai eltolódás. Proton (^1H) kémiai eltolódások és a kémiai szerkezet összefüggései: elektronegativitás, induktív, mezomer effektus, szomszédcsoport-anizotropia, gyűrűáram, hidrogén híd, oldószerhatás. A spektrumvonalak integrált intenzitása.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a kémiai árnyékolás és kémiai eltolódás fogalmát, a proton kémiai eltolódásokat befolyásoló tényezőket, valamint a spektrumvonalak integrált intenzitásának fogalmát.</p>
4. hét	<p>A skaláris spin-spin csatolás, a csatolási állandó. A csatolási állandó és kémiai szerkezet kapcsolata, a Karplus-egyenlet.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a skaláris spin-spin csatolás, a csatolási állandó fogalmát, valamint a kémiai szerkezettel való kapcsolatukat. Tudja értelmezni a Karplus-egyenletet.</p>
5. hét	<p>Kémiai és mágneses egyenértékűség. Homotópia, enantiotópia, diasztereotópia. Gyenge csatolás, az elsőrendű spektrumanalízis szabályai. Erős csatolás, másodrendű spinrendszer.</p> <hr/> <p>TE: Definiálni tudja a kémiai és mágneses egyenértékűség, a homotópia, enantiotópia, diasztereotópia fogalmakat. Felismeri az elsőrendű és másodrendű spinrendszereket és ismeri az elsőrendű spektrumanalízis szabályait.</p>
6. hét	<p>A ^{13}C-NMR spektroszkópia. A ^{13}C kémiai eltolódást befolyásoló tényezők: α-, β- és γ-hatások, induktív, mezomer és sztérikus effektusok.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a ^{13}C kémiai eltolódás fogalmát és az eltolódást befolyásoló tényezőket.</p>
7. hét	<p>A kémiai eltolódás empirikus számítása, additív szabályok. ^1H- és ^{13}C-NMR spektrumok analízise, példák.</p> <hr/> <p>TE: Az additív szabályok ismeretében kémiai eltolódást tud számolni. Az elsajátított fogalmak, törvényszerűségek ismeretében ^1H- és ^{13}C-NMR spektrumokat tud elemezni.</p>
8. hét	<p>Elektromágneses sugárzás, az elektromágneses sugárzás tartományai és energiája. Infravörös színképek keletkezésének feltételei. Rotációs spektrum, rotációs rezgési spektrumok. Erőállandók invarianciájának elve. Karakterisztikus kötési frekvenciák, karakterisztikus csoportrezgés. Felhangsávok. Vegyértékrezgések jellemző tartományai és függésük a kötési energiától és a kötésiállandótól.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri az elektromágneses sugárzás tartományai és energia viszonyait. Ismeri az infravörös színképek keletkezésének feltételeit. Tudja, mit jelentenek a rotációs rezgési spektrumok. Ismeri a vegyértékrezgések fogalmát, jellemző tartományait.</p>
9. hét	<p>Alkánok, alkének, alkinok és aromás vegyületek IR spektrumai. Alkoholok azonosítása, a hidrogénkötés hatása alkoholok IR spektrumára. A karbonil csoport $\text{C}=\text{O}$ vegyértékrezgését befolyásoló intra- és intermolekuláris hatások. Karbonsavak és karbonsavszármazékok IR spektrumai.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a különböző rezgési fajtákat, az alkánok, alkének, alkinok és aromás vegyületek IR spektrumait. Ismeri az alkoholok IR spektrumait. Azonosítani tudja a jellemző vegyértékrezgéseket és az azokat befolyásoló tényezőket.</p>
10. hét	<p>Abszorpciós molekula színképek (UV, IR, Raman) képződése. A Bauger-Lambert-Beer törvény és analitikai alkalmazásai. Elektrongerjesztési átmenetek. Kromoforok UV átmeneteinek maximumhelyei és ϵ értékei. Kiválasztási szabályok. A Jablonski diagram. Frank-Condon elv, batokróm, hipszokróm, hipokróm és hiperkróm eltolódások. Konjugáció, sztérikus gát hatása a kromoforkoplanaritására.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a színképek keletkezését. Ismeri és alkalmazni tudja a Bauger-Lambert-Beer törvényt. A</p>

	kromoforok UV átmeneteit ismeri. Alkalmazza a Frank-Condon elvet.
11. hét	<p>Polién rendszerek konformációja és geometriája. Az oldószer polaritásának hatása az UV színeképre.</p> <p>A tömegspektrometria alapfogalmai. A szerves tömegspektrometria főbb ionizációs módszerei. Molekulák ionizációja.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri az oldószer polaritásának az UV spektrumra gyakorolt hatását. Ismeri a tömegspektrometriás alapfogalmakat, a főbb ionizációs módszereket és a molekulák ionizációját.</p>
12. hét	<p>A molekulaion általános szétbontása, fragmentációja: a tömegspektrum. Az ionizációs módszerek előnyei, hátrányai. A tömegspektrométer felépítése. Mintabeviteli szempontok, többkomponensű minták optimális technikai igényei. Ionforrások, EI ionforrás, CI ionforrás.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a fragmentációt, a tömegspektrumot, a készülékek felépítését, a mintabeviteli módokat és szabályokat. Ismeri az EI és CI forrást, azok közötti különbséget.</p>
13. hét	<p>Molekulák ionizációja: ESI ionforrás, APCI ionforrás. Tömeganalizátorok, típusai. A felbontás. Jel-feldolgozás-detektorok.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri az ESI és APCI forrást, azok közötti különbséget. Ismeri a tömeganalizátorokat, a felbontást, a detektorokat.</p>
14. hét	<p>A szerves tömegspektrometria alapfogalmai, mólécúcs, molekulaion. A nitrogén-szabály, természetes izotópok. A tömegspektrumok értelmezésének általános szempontjai. Fő fragmentációs folyamatok: az α-, benzil-, allil-hasadás. A McLafferty átrendeződés. Szerves vegyületcsaládok általános tömegspektrometriája.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri az alapfogalmakat. Ismeri és alkalmazza a nitrogén-szabályt, a fő fragmentációs folyamatokat. Ismeri a különböző szerves vegyületek jellemző tömegspektrometriás viselkedését.</p>