

A tantárgy neve:	magyarul:	Spektroszkópiai módszerek I.						Kódja:	TTKBE0503	
	angolul:	Spectroscopic methods I.								
A képzés 4. féléve										
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:		Szerves kémia II. (előadás) Mérnöki fizika II.						Kódja:	TTKBE0302 TTFBE2113	
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	x	Heti	2	Heti	0	Heti	0	kollokvium	3	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Erdődiné Dr. Kövér Katalin				beosztása:	egyetemi tanár	
A kurzus célja, hogy a hallgatók										
A kémiai szerkezet felderítés spektroszkópiai módszereinek, alapelveinek és gyakorlati alkalmazásuknak a bemutatása.										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató										
<i>Tudás:</i>										
Ismeri a szerkezet felderítésben alkalmazott spektroszkópiai módszerek alapelveit, törvényszerűségeit, a legfontosabb gyakorlati alkalmazásukat/alkalmazhatóságukat.										
<i>Képesség:</i>										
Képes rendszer szinten értelmezni, alapvető feladatok kapcsán alkalmazni a mágneses magrezonanciára (NMR), a tömegspektrometriára (MS), az infravörös (IR) spektroszkópiára és az ultrabolya/látható (UV/VIS) spektroszkópiára vonatkozó ismereteket, fogalmakat, szabályokat, összefüggéseket.										
Képes önálló spektrumelemzésre, a spektrális adatok meghatározására és az eredmények ismeretében a lehetséges szerkezet(ek) megadására.										
Képes az NMR, MS, IR és UV/VIS ismereteinek bővítésére/továbbfejlesztésére.										
<i>Attitűd:</i>										
Nytított arra, hogy a témakörben új, tudományosan bizonyított ismereteket szerezzen, de elutasítsa a megalapozatlan, esetleg megtévesztő állításokat.										
<i>Autonómia és felelősség:</i>										
Szakmai irányítás mellett megjelölt részfeladatokat önállóan képes a kurzusban szereplő témakörök kapcsán elvégezni, a kapott eredményt értelmezni, valamint reálisan értékelni.										
A kurzus tartalma, témakörei										
<ul style="list-style-type: none"> - A mágneses magrezonancia (NMR) spektroszkópia alapelve - Az atommagok impulzusmomentuma és mágneses sajátságai - Az NMR kiválasztási szabály, a rezonanciafeltétel, a Larmor-precesszió - A makroszkópius mágnesezettség. A kémiai árnyékolás, az ¹H-kémiai eltolódás - A skaláris spin-spin csatolás, a csatolási állandó. A csatolási állandó és kémiai szerkezet, a Karplus-egyenlet - Gyenge csatolás, az elsőrendű spektrumelemzés szabályai. Erős csatolás, másodrendű spinrendszer - ¹³C-NMR spektroszkópia - Az infravörös színeképek keletkezése - IR rezgésfajták és megjelenési formái - Funkciós csoportok jellemző rezgései - Abszorpciós színeképek - Kromoforok és jellemző elnyelési sávjaik - Bauger-Lambert-Beer törvény, Frank-Condon elv - Tömegspektrometriai alapfogalmak - Molekulák ionizációja, ionforrások - Tömeganalizátorok és detektorok - Nitrogén-szabály, izotópok a tömegspektrometriában - Fő fragmentációs folyamatok - Vegyületek tömegspektrometriás viselkedése vegyületcsaládok szerint 										

Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek

Aktív részvétel az órákon
Esetfeldolgozás, gyakorlás egyeztetett témában
Az elhangzott ismeretanyag gyakorlaton történő számonkérése

Értékelés

Kollokvium (100 %)
Jeles: 90 %, jó: 75 %, közepes 60 %, elégséges: 50 %, 50 % alatt elégtelen
- A tantárgyat kollokvium zárja
Sikertelen teljesítés esetén a javítás módja, határideje: a munkakövetelmények utólagos pótlására külön eljárásban nincs lehetőség. A kollokvium sikertelensége esetén javítás, utóvizsga keretében történhet, a TVSZ-ben meghatározottak szerint.

Kötelező olvasmány:

Ajánlott szakirodalom:

1. Szilágyi László: Mágneses rezonancia, 252 old., Tankönyvkiadó, Budapest, 1977, 1987; Kossuth Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2001
2. Szilágyi László: ¹H NMR spektrumok, 160 old., Tankönyvkiadó, Budapest, 1979
3. P.J. Hore: Mágneses magrezonancia, 97 old., Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Budapest, 2003
4. Dinya Z.: Elektronspektroszkópia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1979
5. Dinya Z.: Infravörös spektroszkópia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981
6. Dinya Z.: Szerves tömegspektrometria, Debreceni Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2002
7. Tóth G.; Balázs B.: Szerves vegyületek szerkezetfelderítése, Műegyetemi Kiadó, 2005