

A tantárgy neve:	magyarul:	2D NMR módszerek	Kódja:	TTKMG0318
	angolul:	2D NMR methods		

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>A kétdimenziós (2D) NMR spektroszkópia bevezetése, elméleti alapjai. A 2D NMR kísérletek típusai (homonukleáris, heteronukleáris korreláció). A 2D NMR kísérletek általános sémája, építő elemei, a második (indirekt) frekvencia dimenzió fogalma.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a 2D NMR spektroszkópia elméleti alapjait, a kísérletek főbb típusait és építőelemeit.</p>
2. hét	<p>A kísérletek elméleti leírására szolgáló vektormodell és szorzatoperátor közelítés alapjainak bevezetése, egyszerű alkalmazásainak bemutatása.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a vektormodell és a szorzatoperátor leírás alapjait.</p>
3. hét	<p>A kétdimenziós homonukleáris, proton-proton korrelációs kísérlet, 2D COSY (Correlation Spectroscopy) működési elvének ismertetése. Szorzatoperátor alkalmazása a kísérlet leírására. Koherencia átvitel. Magnitúdó, fázisérzékeny kísérlet, kvadrátúra detektálás. A COSY kísérlet célja, alkalmazásai.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a 2D COSY kísérlet működési elvét, a koherencia átvitel fogalmát.</p>
4. hét	<p>Gyakorlás - 2D COSY spektrum megjelenítése, a spektrum jellegzetes csúcsainak bemutatása, a csatolási korrelációk (konnectivitási háló) vizsgálata, teljes spektrumelemzés. További spektrumelemzési feladatok gyakorlása.</p> <hr/> <p>TE: Képes önállóan a 2D COSY kísérlet során kapott spektrum megjelenítésére és értékelésére.</p>
5. hét	<p>A kétdimenziós homonukleáris, teljes proton-proton korrelációs kísérlet, 2D TOCSY (Total Correlation Spectroscopy) működési elvének ismertetése. A spin-lock tér fogalma, összetett impulzus-szekvencia bevezetése, MLEV szekvencia. Izotróp keveredés, mágneszettség átvitel a spinrendszeren belül. A TOCSY kísérlet célja, alkalmazása.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a 2D TOCSY kísérlet működési elvét, a spinrendszeren belüli mágneszettség átvitel alapját.</p>
6. hét	<p>Gyakorlás - 2D TOCSY spektrum megjelenítése, a spektrum jellegzetes csúcsainak bemutatása, a csatolási korrelációk vizsgálata, a spinrendszer(ek) tagjainak meghatározása, teljes spektrumelemzés. További spektrumelemzési feladatok gyakorlása COSY és TOCSY spektrumok alapján.</p> <hr/> <p>TE: Képes 2D TOCSY spektrum önálló elemzésére, a spinrendszer(ek) tagjainak feltérképezésére.</p>
7. hét	<p>A mag-Overhauser-spektroszkópia (NOE) elve. A dipoláris relaxáció, keresztrelaxáció és a molekuláris mozgás kapcsolata. Autokorrelációs függvény, spektrális sűrűségfüggvény fogalma. Az NOE előjelének függése a molekuláris mozgás korrelációs idejétől (lassú, gyors mozgási tartomány), a molekulaméret, az oldószer (viszkozitás) és a hőmérséklet hatása.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a mag-Overhauser effektus alapelvét, a dipoláris relaxáció és a molekuláris mozgás meghatározó szerepét az effektus nagyságára és előjelére.</p>
8. hét	<p>Dipoláris kereszt-relaxáción alapuló kétdimenziós homonukleáris kísérletek álló- és forgó koordináta rendszerben: a 2D NOESY (Nuclear Overhauser Effect Spectroscopy) és a 2D ROESY (Rotating-frame Overhauser Effect Spectroscopy) kísérletek működési elve. Az NOE/ROE keresztcsúcsok intenzitása alapján számolható (becsülhető) ^1H-^1H magtávolság. NOESY/ROESY kísérletek alkalmazásai (tér)szerkezeti problémák megoldására.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a 2D NOESY/ROESY kísérletek működési elvét, alkalmazásait és alkalmazhatóságának határait/korlátait. Képes 2D NOESY/ROESY spektrumok önálló elemzésére. szerkezeti információk kinyerésére.</p>
9. hét	<p>Homo- és heteronukleáris spin-visszhang (spin-echo) szekvenciák ismertetése és leírása a szorzatoperátor közelítés alkalmazásával. Az INEPT szekvencia, a heteronukleáris polarizáció átvitel fogalma.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a spin-echo szekvenciát, a polarizáció átvitel fogalmát, az INEPT szekvenciát és jelentőségét.</p>
10. hét	<p>A kétdimenziós egykötéses heteronukleáris korrelációs kísérlet, a 2D HSQC (Heteronuclear Single-Quantum Correlation) szekvencia működési elvének ismertetése. A HSQC kísérlet célja, alkalmazása.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a HSQC kísérlet alapelvét és alkalmazásait.</p>
11. hét	<p>Gyakorlás - A 2D HSQC spektrum megjelenítése, a spektrum jellegzetes csúcsainak bemutatása,</p>

	<p>spektrumelemzés, teljes $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ jelhozzárendelés. Spektrumelemzési feladatok gyakorlása.</p> <hr/> <p>TE: Képes 2D HSQC spektrum megjelenítésére és önálló értékelésére.</p>
12. hét	<p>A kétdimenziós többkötéses heteronukleáris korrelációs kísérlet, a 2D HMBC (Heteronuclear Multiple-Bond Correlation) szekvencia működési elvének ismertetése. A HMBC kísérlet célja, alkalmazása.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a HMBC kísérlet alapelvét és alkalmazásait.</p>
13. hét	<p>Gyakorlás - 2D homo- és heteronukleáris NMR spektrumok komplex elemzése, teljes ^1H és ^{13}C jelhozzárendelés, (tér)szerkezeti problémák megoldása.</p> <hr/> <p>TE: Képes 2D NMR spektrumok alapján összetett szerkezeti problémák megoldására.</p>
14. hét	<p>Víznyomás kísérleti lehetőségeinek áttekintése. A víz-mágnesezettség szelektív besugárzása/előtelítése (presaturation) a kísérletek közti várakozási idő alatt. Víznyomás tér-gradiens impulzusok alkalmazásával, a gradiens spin-echo kísérlet ismertetése – a Watergate szekvencia.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a víznyomásra használt kísérletek alapelvét, alkalmazhatóságát és annak korlátait.</p>