

A tantárgy neve:	magyarul:	NMR operátori gyakorlat II.	Kódja:	TTKMG0530
	angolul:	Advanced NMR practical course		

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>A mérési gyakorlaton használt 400 MHz-es NMR spektrométer fő részeinek bemutatása. A mérések előtti feladatok ismertetése és bemutatása, lockolás, shimelés, mérőfej hangolása, impulzus kalibrálás.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri az NMR laboratóriumra vonatkozó balesetvédelmi/balesetmegelőzési szabályokat, előírásokat, és azokat szigorúan betartja. Ismeri a gyakorlaton használt készülék, Bruker Avance II 400, főbb egységeit. Képes önállóan elvégezni a méréseket megelőző, méréseket előkészítő tennivalókat – lockolást, shimelést, hangolást, impulzus kalibrálást.</p>
2. hét	<p>Gyakorlás – minden hallgató önállóan elvégzi, bemutatja a méréseket előkészítő tennivalókat (lockolás, shimelés, hangolás, kalibrálás). A kétdimenziós (2D) NMR spektroszkópia bevezetése, 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 alapjait, a kísérletek főbb típusait és építőelemeit.</p>
3. hét	<p>Skaláris spin-spin csatoláson alapuló kétdimenziós homonukleáris kísérletek (I.) - 2D homonukleáris, proton-proton korrelációs kísérlet, 2D COSY (Correlation Spectroscopy). A kísérlet működési elvének ismertetése, a mérési paraméterek (spektrális ablak, kísérletek és tranziensek száma, várakozási idő) helyes megválasztása, optimalizálása a vizsgált mintára.</p> <hr/> <p>TE: Képes ismeretlen mintán 2D COSY kísérletet önállóan elvégezni, a mérési paramétereket a vizsgált mintára optimálisan beállítani.</p>
4. hét	<p>Gyakorlás – COSY kísérlet parametrizálása, elindítása. A kísérlet eredményeként kapott adatok feldolgozása – megfelelő súlyfüggvény használata, zérustöltés, 2D Fourier tranzformáció. A 2D COSY spektrum megjelenítése, a spektrum jellegzetes csúcsainak bemutatása, a csatolási korrelációk (konkativitási térkép) vizsgálata, teljes spektrumelemzés.</p> <hr/> <p>TE: Képes önállóan a 2D COSY kísérlet során kapott mérési adatok feldolgozásra, a spektrum megjelenítésére és értékelésére.</p>
5. hét	<p>Skaláris spin-spin csatoláson alapuló kétdimenziós homonukleáris kísérletek (II.) - 2D homonukleáris teljes proton-proton korrelációs kísérlet, 2D TOCSY (Total Correlation Spectroscopy). A kísérlet működési elvének ismertetése, a mérési paraméterek (spektrális ablak, keverési idő, kísérletek és tranziensek száma, várakozási idő) helyes megválasztása, optimalizálása a vizsgált mintára.</p> <hr/> <p>TE: Képes ismeretlen mintán 2D TOCSY kísérletet önállóan elvégezni, a mérési paramétereket a vizsgált mintára optimálisan beállítani.</p>
6. hét	<p>Gyakorlás – TOCSY kísérlet parametrizálása, elindítása. A kísérlet eredményeként kapott adatok feldolgozása – megfelelő súlyfüggvény használata, zérustöltés, 2D Fourier tranzformáció, fáziskorrektúra. A 2D TOCSY spektrum megjelenítése, a spektrum jellegzetes csúcsainak bemutatása, a csatolási korrelációk vizsgálata, a spinrendszer(ek) tagjainak meghatározása, teljes spektrumelemzés.</p> <hr/> <p>TE: Képes önállóan a 2D TOCSY kísérlet során kapott mérési adatok feldolgozásra, a spektrum megjelenítésére és értékelésére.</p>
7. hét	<p>Téren átható kölcsönhatáson, 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. A relaxáció és a molekuláris mozgás (dinamika) kapcsolata, gyors és lassú molekuláris mozgás, az NOE előjele. A kísérletek működési elvének ismertetése, a mérési paraméterek (spektrális ablak, keverési idő, kísérletek és tranziensek száma, várakozási idő) helyes megválasztása, optimalizálása a vizsgált mintára.</p> <hr/> <p>TE: Képes ismeretlen mintán önállóan 2D ROESY/NOESY kísérletet végezni, a mérési paramétereket a vizsgált mintára optimálisan beállítani.</p>
8. hét	<p>Gyakorlás – NOESY/ROESY kísérlet parametrizálása, elindítása. A kísérlet eredményeként kapott adatok feldolgozása – megfelelő súlyfüggvény használata, zérustöltés, 2D Fourier tranzformáció, fáziskorrektúra. A 2D spektrum megjelenítése, a spektrum jellegzetes csúcsainak bemutatása, a térben közeli hidrogének meghatározása a ROESY/NOESY keresztcsúcsok alapján, teljes spektrumelemzés.</p> <hr/> <p>TE: Képes önállóan a 2D NOESY/ROESY kísérlet során kapott mérési adatok feldolgozásra, a spekt-</p>

	rum megjelenítésére és értékelésére.
9. hét	<p>Kétdimenziós egykötéses heteronukleáris korrelációs kísérlet, a 2D HSQC (Heteronuclear Single-Quantum Correlation) szekvencia. A kísérlet működési elvének ismertetése, a mérési paraméterek (^1H, ^{13}C spektrális ablak, csatolási evolúciós idő, kísérletek és tranziensek száma, várakozási idő, X-lecsatolás) helyes megválasztása, optimalizálása a vizsgált mintára.</p> <hr/> <p>TE: Képes ismeretlen mintán önállóan 2D HSQC kísérletet végezni, a mérési paramétereket a vizsgált mintára optimálisan beállítani.</p>
10. hét	<p>Gyakorlás – HSQC kísérlet parametrizálása, elindítása. A kísérlet eredményeként kapott adatok feldolgozása – megfelelő súlyfüggvény használata, zérustöltés, 2D Fourier tranzformáció, fáziskorrekció. A 2D spektrum megjelenítése, a spektrum jellegzetes csúcsainak bemutatása, spektrumelemzés, teljes $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ jelhozzárendelés.</p> <hr/> <p>TE: Képes önállóan a 2D HSQC kísérlet során kapott mérési adatok feldolgozásra, a spektrum megjelenítésére és értékelésére.</p>
11. hét	<p>Gyakorlás – minden eddig megismert 2D homo- és heteronukleáris kísérlet beállításának gyakorlása ismeretlen mintákon.</p> <hr/> <p>TE: Képes önállóan, tetszőleges mintán 2D kísérleteket végezni.</p>
12. hét	<p>Gyakorlás – minden eddig megismert 2D homo- és heteronukleáris korrelációs kísérlet mérési eredményeinek feldolgozása, spektrumok megjelenítése, értékelése, jelhozzárendelés, (tér)szerkezetre vonatkozó információk megállapítása.</p> <hr/> <p>TE: Képes önállóan 2D NMR spektrumok értékelésére, spektrális paraméterek meghatározására, térszerkezetre vonatkozó adatok meghatározására.</p>
13. hét	<p>Kétdimenziós többkötéses heteronukleáris korrelációs kísérlet, a 2D HMBC (Heteronuclear Multiple-Bond Correlation) szekvencia. A kísérlet működési elvének ismertetése, a mérési paraméterek (^1H, ^{13}C spektrális ablak, csatolási evolúciós idő, kísérletek és tranziensek száma, várakozási idő) helyes megválasztása, optimalizálása a vizsgált mintára. A mérési adatok feldolgozása, spektrumelemzés.</p> <hr/> <p>TE: Képes ismeretlen mintán önállóan 2D HMBC kísérletet végezni, a mérési paramétereket a vizsgált mintára optimálisan beállítani, a mérési adatot feldolgozni, a kapott spektrumot értékelni.</p>
14. hét	<p>Vízelnomás kísérleti lehetőségeinek ismertetése és bemutatása. A víz-mágneszettség szelektív besugárzása/előtelítése (presaturation) a kísérletek közti várakozási idő alatt. Vízelnomás térgradiens impulzusok alkalmazásával, a gradiens spin-echo kísérlet ismertetése – a Watergate szekvencia alkalmazása, mérési paramétereinek beállítása.</p> <hr/> <p>TE: Képes önállóan könnyű vizes mintán NMR mérést végezni a megfelelő vízelnomási szekvencia alkalmazásával.</p>