

A tantárgy neve:	magyarul:	Szerkezetvizsgáló módszerek I.	Kódja:	TTKME0502 TTKME0502_L
	angolul:	Spectroscopic methods for structure investigation I.		

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>A tömegspektrometria alapfogalmai. Izotópok a tömegspektrometriában. Felbontás és értelmezése. Legfontosabb fragmentációs folyamatok. Nitrogén-szabály alkalmazása különböző ionokra.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a legfontosabb alapfolyamatokat és azokat készség szinten alkalmazza.</p>
2. hét	<p>A lágy ionizációs technikák. Ionképzés a folyadékkromatográfiával kapcsolt rendszerekben. Az ESI és APCI spektrumok keletkezése, a spektrumok értelmezése. pH, pKa és azok jelentése az MS vizsgálatok során. MS kompatibilis eluensek készítésének szabályai.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a lágy ionizációs folyamatokat, felismeri a spektrumokat és azokat értelmezni tudja.</p>
3. hét	<p>A tandem tömegspektrometria alapjai. Tandem készülék felépítése, működése. MSMS kísérletek felépítése, azok használatának szabályai. Jel/zaj viszony. A tandem mérések legfontosabb alkalmazási területei példákon keresztül.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a tandem MS készülékeket és a legfontosabb mérési módokat. Ismeri a feladathoz szükséges mérési módot, ismeri a várható eredményt.</p>
4. hét	<p>Fluoreszcencia spektroszkópia alapelve és alkalmazási lehetőségei. Fluoroforok.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a Jablonski diagrammot és a fluoreszcencia gerjesztési és emissziós spektrumok sajátosságait.</p>
5. hét	<p>Raman spektroszkópia alapelve és alkalmazási lehetőségei.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a rugalmas és nem rugalmas fényszórás sajátosságait az IR tartományban.</p>
6. hét	<p>Kiroptikai módszerek áttekintése. Cirkuláris dikroizmus és cirkuláris kettőtörés.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a cirkulárisan polarizált fénykomponensek és a királis, nem racém anyag kölcsönhatását és ennek alkalmazási lehetőségeit.</p>
7. hét	<p>A makroszkópikus mágnesezettség fogalma, a mágneses energiaszintek - Zeeman-szintek - betöltöttsége. A makroszkópikus mágnesezettség mozgásegyenlete – a Bloch-egyenletek bevezetése.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a makroszkópikus mágnesezettség fogalmát és a Bloch-egyenlet általános alakját</p>
8. hét	<p>Az álló és forgó koordináta-rendszer fogalmának bevezetése. A Bloch-egyenletek megoldása speciális esetekben, álló és forgó koordináta rendszerben. A rezonancia-sáv alakja, a telítés jelensége.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a Bloch-egyenletek analitikus megoldásait speciális esetekben.</p>
9. hét	<p>A magspin-relaxáció fogalma, jelentősége és fajtái: spin-rács vagy longitudinális relaxációs idő (T_1) és a spin-spin vagy tranzverzális (T_2) relaxációs idő.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a T_1 és T_2 relaxációs idők fogalmát és jelentőségét.</p>
10. hét	<p>Relaxációs mechanizmusok. Dipólus-dipólus, kémiai eltolódás anizotrópia, skaláris, kvadrupólus, paramágneses relaxáció fogalma, jelentősége, alkalmazásai.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a különböző relaxációs mechanizmusokat.</p>
11. hét	<p>T_1 mérése - a mágnesezettség invertálás módszere. T_2 mérése - a spinvisszhang kísérlet.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a spin-rács relaxációs idő mérésére alkalmazott kísérlet működési elvét. Ismeri a spin-spin relaxációs idő mérésére alkalmazott kísérlet működési elvét.</p>
12. hét	<p>A dinamikus NMR alapjai, a kémiai csere, lassú, gyors és közepes sebességű kéthelycsere, az NMR időskála.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a dinamikus NMR alapjait, a lassú, gyors és közepes sebességű kéthelycsere fogalmát, az NMR időskálát.</p>
13. hét	<p>Az NMR kettős-rezonancia módszer és alkalmazásai, a mag-Overhauser-hatás (NOE) és alkalmazásai.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri az NOE alapjait és alkalmazási lehetőségeit a szerkezet (konformáció, konfiguráció) meghatározásában.</p>
14. hét	<p>Az impulzus Fourier (FT) NMR módszer alapjai. Kétdimenziós (2D) NMR alapjai.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri az FT NMR és a 2D NMR alapjait és gyakorlati jelentőségét.</p>

