

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 ultraióbolya/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

Heti bontott tematika

1. hét	Az NMR spektroszkópia története, alapelve. Az atommagok impulzusmomentuma és mágneses sajátságai. NMR aktív magok. <hr/> TE: Ismeri az atommagok mágneses tulajdonságait, az NMR aktív magokat.
2. hét	A mágneses mező hatása (Zeeman-kölcsönhatás), az NMR kiválasztási szabály, a rezonanciafeltétel, a Larmor-precesszió. A Zeeman-szintek betöltöttsége, a makroszkópikus mágnesezettség. <hr/> TE: Ismeri a mágneses mező hatását az atommagokra, az NMR kiválasztási szabályt. Ismeri a rezonanciafeltételt, a Larmor-precessziót, valamint a makroszkópikus mágnesezettség fogalmát.
3. hét	A kémiai árnyékolás, a kémiai eltolódás. Proton (¹ H) kémiai eltolódások és a kémiai szerkezet összefüggései: elektronegativitás, induktív, mezomer effektus, szomszédcsoport-anizotropia, gyűrűáram, hidrogén híd, oldószerhatás. A spektrumvonalak integrált intenzitása. <hr/> TE: Ismeri a kémiai árnyékolás és kémiai eltolódás fogalmát, a proton kémiai eltolódásokat befolyásoló tényezőket, valamint a spektrumvonalak integrált intenzitásának fogalmát.
4. hét	A skaláris spin-spin csatolás, a csatolási állandó. A csatolási állandó és kémiai szerkezet kapcsolata, a Karplus-egyenlet. <hr/> TE: Ismeri a skaláris spin-spin csatolás, a csatolási állandó fogalmát, valamint a kémiai szerkezettel való kapcsolatukat. Tudja értelmezni a Karplus-egyenletet.
5. hét	Kémiai és mágneses egyenértékűség. Homotópia, enantiotópia, diasztereotópia. Gyenge csatolás, az elsőrendű spektrumanalízis szabályai. Erős csatolás, másodrendű spinrendszer. <hr/> 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.
6. hét	A ¹³ C-NMR spektroszkópia. A ¹³ C kémiai eltolódást befolyásoló tényezők: α-, β- és γ-hatások, induktív, mezomer és szterikus effektusok. <hr/> TE: Ismeri a ¹³ C kémiai eltolódás fogalmát és az eltolódást befolyásoló tényezőket.
7. hét	A kémiai eltolódás empirikus számítása, additivitási szabályok. ¹ H- és ¹³ C-NMR spektrumok

	<p>analízise, példák.</p> <hr/> <p>TE: Az additivitási 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 színeképek keletkezésének feltételei. Rotációs spektrum, rotációs rezgési spektrumok. Erőálló invarianciájának elve. Karakterisztikus kötési frekvenciák, karakterisztikus csoportrezgés. Felhangsávok. Vegyértékrezgések jellemző tartományai és függésük a kötési energiától és a kötésállandótól.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri az elektromágneses sugárzás tartományai és energia viszonyait. Ismeri az infravörös színeképek 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 hidrogén kötés 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 színeképek (UV, IR, Raman) képződése. A Bauger-Lambert-Beer törvény és analitikai alkalmazásai. Elektronerjesztési átmenetek. Kromoforok UV átmeneteinek maximumhelyei és ϵ értékei. Kiválasztási szabályok. A Jablonski diagram. Frank-Condon elv, batokró, hipszokró, hipokró és hiperkróm eltolódások. Konjugáció, szterikus gát hatása a kromoforkoplanaritására.</p> <hr/> <p>TE: Ismeri a színeképek keletkezését. Ismeri és alkalmazni tudja a Bauger-Lambert-Beer törvényt. A kromoforok UV átmeneteit ismeri. Alkalmazza a Frank-Condon elvet.</p>
11. hét	<p>Polién rendszerek konformációja és geometriája. Az oldószer polaritásának hatása az UV színeképekre. 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. Jelfeldolgozás-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, mólcsúcs, 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>