

A tantárgy neve:		magyarul:	Szerkezetvizsgáló módszerek I.					Kódja:	TTKME0502 TTKME0502_L	
		angolul:	Spectroscopic methods for structure investigation I.							
A képzés 3. féléve (2. őszi félév)										
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:							Kódja:			
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	X	Heti	2	Heti	0	Heti	0	Kollokvium	3	magyar
Levelező	X	Féléves	8	Féléves	0	Féléves	0			
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Erdődiné Dr. Kövér Katalin			beosztása:	egyetemi tanár		
A kurzus célja, hogy a hallgatók										
A kémiai szerkezetkutatásban alkalmazott korszerű spektroszkópai módszerek elvi és mérés technikai alapjainak olyan szintű ismertetése, amely szükséges és elegendő a gyakorlatban tipikusan felmerülő szerkezeti problémák megoldásához.										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató										
<i>Tudás:</i>										
Ismeri a szerkezet felderítésben alkalmazott korszerű spektroszkópai módszerek elvét, ismeri a mérés technikákat.										
<i>Képesség:</i>										
Képes rendszer szinten értelmezni, példák kapcsán alkalmazni a mágneses magrezonanciára (NMR) vonatkozó ismereteket, fogalmakat, összefüggéseket, mérés technikákat										
Képes az NMR ismereteinek kibővítésére/továbbfejlesztésére										
Képes a lágy ionizációs technikák alkalmazására, a modern tömegspektrometriás módszerek alkalmazására feladatmegoldásra										
Képes kiválasztani és alkalmazni a feladatnak legjobban megfelelő kapcsolt MS technikákat										
Képes fluoreszcens, Raman és ECD spektroszkópia alkalmazására szerkezetvizsgálati problémák megoldására										
<i>Attitűd:</i>										
Nyitott 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"> - ESI, APPI és APCI ionizáció - Spektrumok keletkezése, ionok azonosítása - MSMS technikák - Kapcsolt módszerek, LC-GC-MS - Fluoreszcencia spektroszkópia alapelve és alkalmazási lehetőségei - Raman spektroszkópia alapelve és alkalmazási lehetőségei - Cirkuláris dikroizmus és cirkuláris kettőtörés - A makroszkópikus mágnesezettség mozgásegyenletei: a Bloch-egyenletek. A Bloch-egyenletek megoldása - A magspin-relaxáció: spin-rács (T_1) és a spin-spin (T_2) relaxációs idő - Relaxációs idők mérése - Relaxációs mechanizmusok - Az impulzus Fourier NMR alapelve - A dinamikus NMR alapjai, kéthelycsere, lassú, gyors és közepes sebességű csere. Az NMR időskála - A dinamikus NMR alkalmazásai - NMR kettős-rezonancia módszer, a mag-Overhauser-hatás és alkalmazásai - Kétdimenziós (2D) NMR alapjai 										

Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek

Aktív részvétel az órákon

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, Tankönyvkiadó, Budapest, 1987, Kossuth Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2001
2. P.J.Hore: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó RT, Budapest, 2003
3. Dinya Z.: Elektronspektroszkópia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1979
4. Dinya Z.: Infravörös spektroszkópia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1981
5. Dinya Z.: Szerves tömegspektrometria, Debreceni Egyetemi Kiadó, Debrecen, 2002

Heti bontott tematika

1. hét	A tömegspektrometria alapfogalmai. Izotópok a tömegspektrometriában. Felbontás és értelmezése. Legfontosabb fragmentációs folyamatok. Nitrogén-szabály alkalmazása különböző ionokra. <hr/> TE: Ismeri a legfontosabb alapfolyamatokat és azokat készség szinten alkalmazza.
2. hét	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. <hr/> TE: Ismeri a lágy ionizációs folyamatokat, felismeri a spektrumokat és azokat értelmezni tudja.
3. hét	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. <hr/> TE: Ismeri a tandem MS készülékeket és a legfontosabb mérési módokat. Ismeri a feladathoz szükséges mérési módot, ismeri a várható eredményt.
4. hét	Fluoreszcencia spektroszkópia alapelve és alkalmazási lehetőségei. Fluoroforok. <hr/> TE: Ismeri a Jablonski diagrammot és a fluoreszcencia gerjesztési és emissziós spektrumok sajátosságait.
5. hét	Raman spektroszkópia alapelve és alkalmazási lehetőségei. <hr/> TE: Ismeri a rugalmas és nem rugalmas fényszórás sajátosságait az IR tartományban.
6. hét	Kiroptikai módszerek áttekintése. Cirkuláris dikroizmus és cirkuláris kettőtörés. <hr/> TE: Ismeri a cirkulárisan polarizált fénykomponensek és a királis, nem racém anyag kölcsönhatását és ennek alkalmazási lehetőségeit.
7. hét	A makroszkópikus mágneszettség fogalma, a mágneses energiaszintek - Zeeman-szintek - betöltöttsége. A makroszkópikus mágneszettség mozgásegyenlete – a Bloch-egyenletek bevezetése. <hr/> TE: Ismeri a makroszkópikus mágneszettség fogalmát és a Bloch-egyenlet általános alakját
8. hét	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. <hr/> TE: Ismeri a Bloch-egyenletek analitikus megoldásait speciális esetekben.

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 mágneszettség 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>