

A tantárgy neve:	magyarul:	2D NMR módszerek						Kódja:	TTKMG0318	
	angolul:	2D NMR methods								
A képzés 3. féléve (2. őszi félév)										
Felelős oktatási egység:		DE TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék								
Kötelező előtanulmány neve:		NMR operátori gyakorlat I. vagy NMR operátori gyakorlat						Kódja:	TTKBL0004 vagy TTKML0004	
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	X	Heti	0	Heti	2	Heti	0	gyakorlati jegy	2	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Erdődiné Dr. Kövér Katalin				beosztása:	egyetemi tanár	
A kurzus célja , hogy a hallgatók A képzés célja, hogy a hallgatók megismerjék a fontosabb 2D NMR kísérleteket és azok működési elvét.										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató <i>Tudás:</i> Ismeri a szerkezet felderítésben alkalmazott különböző kétdimenziós (2D) NMR spektroszkópiai módszerek elvét. <i>Képesség:</i> Képes rendszer szinten értelmezni, alapvető feladatok kapcsán alkalmazni a mágneses magrezonanciára (NMR) vonatkozó ismereteket, fogalmakat, szabályokat, összefüggéseket. Képes egy adott szerkezeti probléma megoldására 2D NMR módszerek alkalmazásával. Képes az NMR ismereteinek bővítésére/továbbfejlesztésére. <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 - 2D NMR spektroszkópia elméleti alapjai, a második (indirekt) frekvencia dimenzió bevezetése. - 1D és 2D kísérletek leírása, értelmezése a vektormodell és a szorzatoperátor formalizmus alkalmazásával. - 2D homo- és heteronukleáris NMR kísérletek: COSY, TOCSY, NOESY, ROESY, HSQC, HMBC. - 2D NMR kísérletek eredményének feldolgozása, 2D Fourier transzformáció, 2D spektrumok elemzése, spektrális és szerkezeti paraméterek meghatározása, összetett feladatok, problémák megoldása.										
Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek Aktív részvétel az órákon.										
Értékelés Gyakorlati jegy (100 %) Jeles: 90 %, jó: 75 %, közepes 60 %, elégséges: 50 %, 50 % alatt elégtelen Sikertelen teljesítés esetén a javítás módja, határideje: a munkakövetelmények utólagos pótlására külön eljárásban nincs lehetőség.										
Kötelező olvasmány: Ajánlott szakirodalom: 1. P. J. Hore, Mágneses Magrezonancia (fordította: Dr. Szilágyi László, Nemzeti Tankönyvkiadó) 2. T. D. W. Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Elsevier Ltd. 1999 62 3. A. E. Derome, Modern NMR Techniques for Chemistry Research, Pergamon Press, Oxford, 1987 4. S. Berger, S. Braun, 200 and More NMR Experiments. A practical course, Wiley-VCH, 2004										

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, kvadratúra 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, 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/előteltítése (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>