

|   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
|---|---|----------------|--|-----------|-----------------------------------|---------|---|------------------------|--------------------------|----------------|
| A tantárgy neve:  |   | magyarul:      | <b>Szerkezetvizsgáló módszerek II.</b>                       |           |                                   |         |   | Kódja:                 | TTKML0502<br>TTKML0502_L |                |
|   |   | angolul:       | <b>Spectroscopic methods for structure investigation II.</b> |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| <b>A képzés 3. féléve (2. őszi félév)</b>   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| Felelős oktatási egység:  |   |                | <b>DE TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék</b>       |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| Kötelező előtanulmány neve:   |   |                |  |           |                                   |         |   | Kódja:                 |                          |                |
| Típus   |   | Heti óraszámok |  |           |                                   |         |   | Követelmény            | Kredit                   | Oktatás nyelve |
|   |   | Előadás        |  | Gyakorlat |                                   | Labor   |   |                        |                          |                |
| Nappali   | X | Heti           | 0  | Heti      | 3                                 | Heti    | 0 | <b>gyakorlati jegy</b> | <b>2</b>                 | <b>magyar</b>  |
| Levelező  | X | Féléves        | 0  | Féléves   | 15                                | Féléves | 0 |                        |                          |                |
| Tantárgyfelelős oktató  |   |                | neve:  |           | <b>Erdődiné Dr. Kövér Katalin</b> |         |   | beosztása:             | <b>egyetemi tanár</b>    |                |
| <b>A kurzus célja, hogy a hallgatók</b>   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| Tantermi számolási, illetve spektrumelemzési példák segítségével a hallgató gyakorlati ismeretekre tesz szert a különböző korszerű spektroszkópai módszerek alkalmazására a kémiai szerkezet meghatározásban.   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| <b>Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató</b>   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| <i>Tudás:</i>   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| Ismeri a szerkezet felderítésben alkalmazott spektroszkópai módszerek legfontosabb gyakorlati alkalmazásukat/alkalmazhatóságukat.   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| <i>Képesség:</i>  |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| Képes számolási gyakorlatokat megoldani a Zeeman-kölcsönhatás, Boltzmann-eloszlás, kémiai árnyékolás, kémiai eltolódási skálák témaköréből.   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| Képes az additivitási eltolódás-szabályok alapján <sup>1</sup> H kémiai eltolódásokat számolni.   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| Képes bonyolultabb <sup>1</sup> H és <sup>13</sup> C NMR példák megfejtésére.   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| Képes összetett példák, spektrumok elemzésére.  |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| Képes összetett, NMR, MS, IR és UV spektrumok elemzésére.   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| Képes a spektrumok alapján a legvalószínűbb szerkezetek megadására.   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| <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.  |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| <b>A kurzus tartalma, témakörei</b>   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>- Számolási gyakorlatok: Zeeman-kölcsönhatás, Boltzmann-eloszlás, kémiai árnyékolás, kémiai eltolódási skálák</li> <li>- Additivitási szabályok <sup>1</sup>H kémiai eltolódás számolására</li> <li>- <sup>1</sup>H és <sup>13</sup>C NMR alkalmazása molekulaszervezet, térszerkezet meghatározására</li> <li>- Bonyolultabb <sup>1</sup>H NMR példák – összetett csatolások figyelembe vételével multiplettek szerkesztése</li> <li>- Komplex NMR feladatok</li> <li>- MS, IR és UV spektrumok elemzése</li> <li>- Az összetett spektrumok alapján szerkezetek hozzárendelése</li> </ul> |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| <b>Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek</b>   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| Aktív részvétel az órákon   |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| <b>Értékelés</b>  |   |                |  |           |                                   |         |   |                        |                          |                |
| 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. Szilágyi László: "1H NMR spektrumok", Tankönyvkiadó, Budapest, 1979, és folyamatos utánnnyomások
2. R.M. Silverstein, F.X. Webster: „Spectrometric Identification of Organic Compounds”, Wiley 1998
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
6. Tóth G.; Balázs B.: Szerves vegyületek szerkezetfelfedezése, Műegyetemi Kiadó, 2005

| Heti bontott tematika |  |
|-----------------------|--|
| 1. hét                | Bevezetés, IR, UV és MS legfontosabb elméleti alapok áttekintése, amelyek szükségesek a komplex feladatmegoldáshoz.<br><hr/> TE: Képes felhasználni az eddigi spektroszkópiai tanulmányait a feladatok megoldásában.   |
| 2. hét                | Alifás nyíltláncú és elágazó láncú vegyületek komplex spektrumelemzése, összpontosítva az IR, UV és MS spektrumaikra. Feladatmegoldás.<br><hr/> TE: Képes felismerni a vizsgált vegyületcsaládok legfontosabb spektrumokból leolvasható jellemzőit.                                      |
| 3. hét                | Halogéntartalmú szerves vegyületek komplex spektrumelemzése, összpontosítva az IR, UV és MS spektrumaikra. Feladatmegoldás.<br><hr/> TE: Képes felismerni a vizsgált vegyületcsaládok legfontosabb spektrumokból leolvasható jellemzőit.   |
| 4. hét                | Aromás vegyületek komplex spektrumelemzése, összpontosítva az IR, UV és MS spektrumaikra. Feladatmegoldás.<br><hr/> TE: Képes felismerni a vizsgált vegyületcsaládok legfontosabb spektrumokból leolvasható jellemzőit.  |
| 5. hét                | Oxigén tartalmú szerves vegyületek, alkoholok, észterek, éterek, karbonsavak komplex spektrumelemzése, összpontosítva az IR, UV és MS spektrumaikra. Feladatmegoldás.<br><hr/> TE: Képes felismerni a vizsgált vegyületcsaládok legfontosabb spektrumokból leolvasható jellemzőit.       |
| 6. hét                | Nitrogén tartalmú szerves vegyületek, aminok, aminosavak, amidok, azidok, nitrilek komplex spektrumelemzése, összpontosítva az IR, UV és MS spektrumaikra. Feladatmegoldás.<br><hr/> TE: Képes felismerni a vizsgált vegyületcsaládok legfontosabb spektrumokból leolvasható jellemzőit. |
| 7. hét                | Számolási gyakorlatok a Zeeman-kölcsönhatás, Boltzmann-eloszlás, kémiai árnyékolás, kémiai eltolódási skálák témaköréből.<br><hr/> TE: Képes számítási példákat önállóan megoldani.  |
| 8. hét                | <sup>1</sup> H NMR példák egyszerű gyengén csatolt spinrendszerekre. Egyszerű spektrumrekonstrukció, multiplettek szerkesztése.<br><hr/> TE: Ismeri az elsőrendű és másodrendű spinrendszereket, egyszerű spektrumokat képes megfejteni az elsőrendű spektrumelemzés szabályai alapján.  |
| 9. hét                | Gyengén csatolt spinrendszerek. Bonyolultabb <sup>1</sup> H NMR példák.<br><hr/> TE: Képes a bonyolultabb <sup>1</sup> H NMR spektrumok jelhozrendelésére.   |
| 10. hét               | Jelátfedések, hiányos spektrális információk. Példák a <sup>13</sup> C NMR szerkezeti alkalmazásaira.<br><hr/> TE: <sup>13</sup> C NMR spektrumokat képes elemezni, szerkezeteket spektrumokhoz hozzárendelni.   |
| 11. hét               | Additivitási eltolódás-szabályok.<br><hr/> TE: Additivitási szabályok alapján képes <sup>1</sup> H kémiai eltolódásokat számolni.  |
| 12. hét               | <sup>1</sup> H és <sup>13</sup> C együttes alkalmazása molekulaszerkezet, térszerkezet meghatározására.  |

|         |   |
|---------|---|
|         | TE: Képes $^1\text{H}$ és $^{13}\text{C}$ NMR spektrális adatok alapján molekulák szerkezetének és térszerkezetének meghatározására.              |
| 13. hét | NMR spektrumok elemzése.<br>TE: Összetett feladatokat képes megoldani, teljes jelhozzárendelést elvégezni.  |
| 14. hét | Összetett NMR spektrumok elemzése.<br>TE: Képes bonyolultabb példák megfejtésére, a spektrumok elemzésével a spektrális adatok pontos megadására. |