

NMR spektroszkópia (KDIT08)

tematika

Oktató: Dr. Dombi György (DombiGyorgy@szte.hu)

1. Spektroszkópiai módszerek áttekintése, felosztása, a fizikai alapfogalmak leírása (makro- és mikrofizikai tárgyalásmód). Az elektromágneses hullám és jellemzése: kvantum energia, hullámhossz-hullámszám-frekvencia közötti összefüggés. A teljes elektromágneses színekép. Fizikai alapok.
2. Optikai spektroszkópiákra vonatkozó általános törvények: Spektrális tartományok (rádiahullám, mikrohullám, infravörös, látható, ultraibolya, Röntgen, γ -sugárzás), a hozzájuk tartozó energia. A klasszikus spektrofotométerek felépítése. NMR spektrométer blokkdiagramja.
3. A spektrumból nyerhető információk: hullámhossz, abszorbancia, és azok felhasználása analitikai célra. Kvalitatív analízis alapjai: a különböző hullámhossztartományok alkalmazása és azok információtartalma.
4. Mágneses magrezonancia spektroszkópia alapjai. Az atommag mágneses momentuma. Mérhető atommagok. A mérés elméleti alapjai: Larmor precesszió, Bloch egyenletek, relaxáció.
5. Kémiai eltolódás, a delta skála. Kémiai szerkezet felderítése a kémiai eltolódás segítségével. Kémiai ekvivalencia. Egyszerű példák.
6. A indirekt csatolási állandó (J). Multiplicitás, elsőrendű felhasadás. A csatolási állandó felhasználása a molekula konfigurációjának és konformációjának meghatározására. Leccsatolás. Mágneses ekvivalencia, spinrendszerek nomenklaturája.
7. Direkt (téren át jövő) csatolás. Szilárd fázisú mérések – CP-MAS. Orientált rendszerek (folyadékkristályok, membránok). Izotróp fázisban megjelenő hatás: Overhauser hatás.
8. Különböző magok spektroszkópiája. Az izotóp természetes előfordulásának szerepe: ^1H – ^{31}P , ^1H – ^{19}F spektrum. Híg magok: ^1H – ^2D , ^1H – ^{13}C spektrum mindkét mag oldaláról, szatellit vonalak értelmezése. Szelektív és széles sávú leccsatolás.
9. A molekula szerkezete és az NMR spektrum. Az NMR és IR összehasonlítása.
10. Egydimenziós NMR spektrumok értékelése I.
11. Egydimenziós NMR spektrumok értékelése II.
12. Egydimenziós NMR spektrumok értékelése III.
13. Egydimenziós NMR spektrumok értékelése IV.
14. Egydimenziós NMR spektrum felvételének gyakorlati megvalósítása.