

Koordinációs kémiai vizsgáló módszerek (KDIT60) tematika

Oktató: Dr. Jancsó Attila (jancso@chem.u-szeged.hu), Dr. Dömötör Orsolya (domotor.o@chem.u-szeged.hu), Dr. Kutus Bence (kutusb@chem.u-szeged.hu), Dr. Gyurcsik Béla (gyurcsik@chem.u-szeged.hu), Dr. Jakusch Tamás (jakusch@chem.u-szeged.hu)

NMR spektroszkópia

- NMR-aktív magok, kémiai eltolódás jellemző tartományai, spin-spin csatolás eltérő magok között, kvadrupólus magok
- Az NMR koordinációs (és egyéb szerves) kémiai alkalmazásai
 - A kémiai eltolódást kialakító hatások
 - A komplexképződés hatása a kémiai eltolódásra
 - Spin-spin csatolások, összetett spinrendszerek
- Relaxáció és relaxációs mechanizmusok
- Dinamikus NMR-spektroszkópia
- Paramágneses fémkomplexek NMR vizsgálatának bemutatása példákon keresztül

PAC (Perturbed Angular Correlations of γ -Rays) spektroszkópia

- Fémion-kötőhely specifikus, hiperfinom kölcsönhatáson alapuló spektroszkópai módszerek, a PAC spektroszkópia elvi alapjai
 - Kvadrupólus mag külső elektromos térben
 - A Nukleáris Kvadrupólus Kölcsönhatás (NQI – nuclear quadrupole interaction)
 - A PAC-spektroszkópia szempontjából lényeges nukleáris energia nivó felhasadása a Nukleáris Kvadrupólus Kölcsönhatás eredményeként
 - γ -fotonok közötti szöghatárreláció a ^{111m}Cd és a ^{111}Ag magok bomlása során
 - A külső elektromos térgradiens hatása a szöghatárrelációra, a perturbációs függvény és a Fourier-transzformációval nyert PAC spektrum
- Idő-függő kölcsönhatások
- PAC spektrumok felvételének technikai megvalósítása, helyszín, elérhető PAC-aktív magok, mintakészítés, adatgyűjtés
- Példák a PAC spektroszkópia alkalmazására a bioszerves kémia területéről

Cirkuláris dikroizmus (CD) spektroszkópia

- CD spektroszkópia a fehérjék és a DNS szerkezetvizsgálatában
- CD spektrumok felvétele során alkalmazott körülmények
- Fehérjék másodlagos szerkezet-összetételének becslésére alkalmas programok
- Fehérje – fémion, DNS – fémion kölcsönhatások vizsgálata
- CD spektrumok kiértékelése – gyakorlati rész

Fluorimetria

- Fluoreszcencia spektrumok, nevezetes csúcsok, törvényszerűségek, kvantumhatásfok, fluoreszcencia élettartam, foszforeszcencia és fluoreszcencia elkülönítése.
- Fluoreszcencia kioltás: statikus és dinamikus eset, látszólagos kioltás. Felhasználás egyensúlyi rendszerek (fémkomplex – fehérje) kölcsönhatások jellemzésére.
- Proton disszociációs folyamatok és komplexképződés követése fluorimetriával, a gerjesztett pK_a fogalma és felismerése. Komplexképzésen alapuló fluoreszcens szenzorok.
- Fluoreszcencia anizotrópia, fluoreszcencia élettartam: makromolekulák, ill. kismolekulák és makromolekulák kölcsönhatásának követése, példák fémkomplex – makromolekula rendszerek jellemzésére.

Mössbauer spektroszkópia

- A Mössbauer spektroszkópia elvi alapjai, a Mössbauer effektus, a Mössbauer spektroszkópiai mérés kivitelezése
- A Mössbauer spektroszkópiával vizsgálható elemek, kísérleti körülmények
- A Mössbauer spektrum, hiperfinom kölcsönhatások és Mössbauer paraméterek
 - Izomer eltolódás
 - Kvadrupólus felhasadás
 - Mágneses felhasadás
- A Mössbauer spektroszkópia alkalmazási lehetőségei
 - Gyakorlati alkalmazási területek
 - Példák vas vegyületek, vas komplexek tulajdonságainak vizsgálatára

Tömegspektrometria

- A tömegspektrometria módszereinek rövid áttekintése
- Tömegspektrometriai lehetőségek koordinációs vegyületek vizsgálatában
- Mintakészítési követelmények
- A tömegspektrometria alkalmazása makromolekula-fémion kölcsönhatások vizsgálatára

Röntgen krisztallográfia

- A Röntgen krisztallográfia módszer alkalmazásának előnyei és hátrányai
- Röntgen krisztallográfiai alapfogalmak, paraméterek
- Egykristály röntgenszerkezet finomításának lépései
- Kristályosítási „screen”-ek
- Gyakorlati példák fémkomplexek Röntgen krisztallográfiai vizsgálatára

Dielektromos relaxációs spektroszkópia

- Az orientációs polarizáció alapjai, energiatartománya
- A dielektromos relaxációs spektrum valós és képzetes része; relatív permittivitás
- A spektrum illesztése és felbontása komponenseire; Debye-egyenlet; dipoláris molekulák
- Az ionpároképződés mechanizmusa és egyensúlyi állandói; ionpárok típusai
- A Cavell-egyenlet; az egyensúlyi állandó meghatározása és a kiterjesztett Debye-Hückel-egyenlet alkalmazása
- A relaxációs idő és kapcsolata az ionpároképződés kinetikájával