

A tantárgy neve:		magyarul:	<b>Szerkezetvizsgáló módszerek II.</b>					Kódja:	TTKML0502 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>										
Nytott 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. <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. <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. <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. <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. <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. <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. <hr/> TE: Képes számítási példákat önállóan megoldani.
8. hét	<sup>1</sup> H NMR példák egyszerű gyengén csatolt spinrendszerekre. Egyszerű spektrumrekonstrukció, multiplettek szerkesztése. <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. <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. <hr/> TE: <sup>13</sup> C NMR spektrumokat képes elemezni, szerkezeteket spektrumokhoz hozzárendelni.
11. hét	Additivitási eltolódás-szabályok. <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 molekulaszervezet, 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. TE: Összetett feladatokat képes megoldani, teljes jelhozzárendelést elvégezni.
14. hét	Összetett NMR spektrumok elemzése. TE: Képes bonyolultabb példák megfejtésére, a spektrumok elemzésével a spektrális adatok pontos megadására.