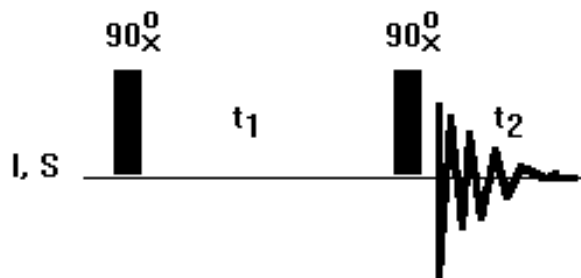


## COSY



*memo:* (detektálás az x tengely mentén)

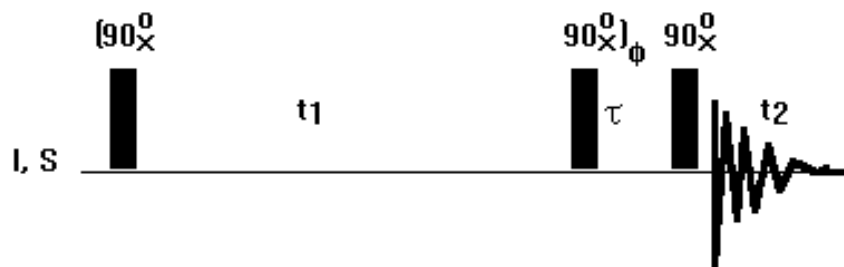
diagonális elem

*off*-diagonális elem

$$+I_x \sin(\Omega_I t_1) \cos(\pi J_{IS} t_1) \cos(\Omega_I t_2) \cos(\pi J_{IS} t_2)$$

$$+I_x \sin(\Omega_S t_1) \sin(\pi J_{IS} t_1) \cos(\Omega_I t_2) \sin(\pi J_{IS} t_2)$$

## DQF-COSY



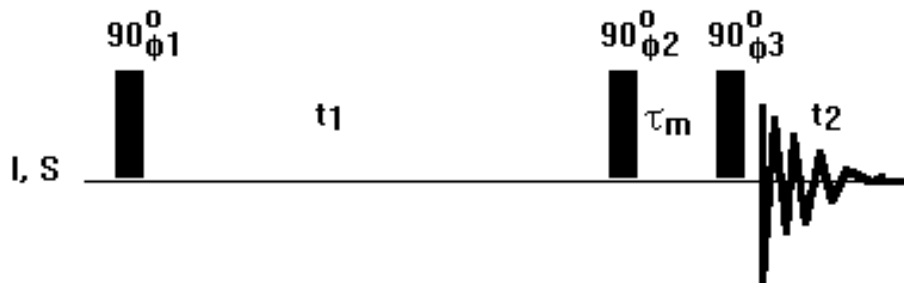
diagonális elem

*off*-diagonális elem

$$-1/2 I_x \cos(\Omega_I t_1) \sin(\pi J_{IS} t_1) \sin(\Omega_I t_2) \sin(\pi J_{IS} t_2)$$

$$-1/2 I_x \cos(\Omega_S t_1) \sin(\pi J_{IS} t_1) \sin(\Omega_I t_2) \sin(\pi J_{IS} t_2)$$

## NOESY



diagonális elem

*off*-diagonális elem

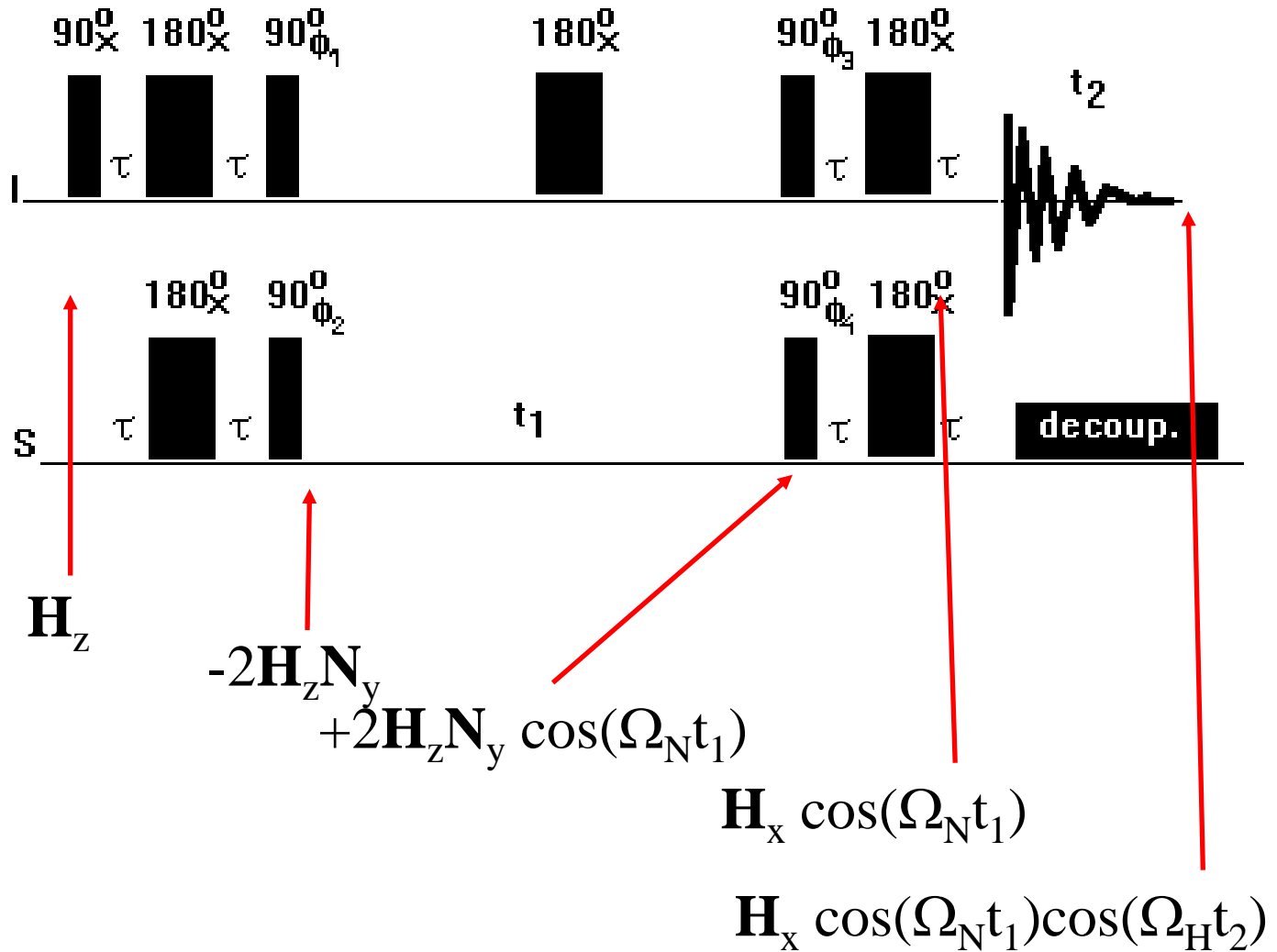
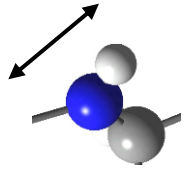
$$-I_x a_{II} \cos(\Omega_I t_1) \cos(\pi J_{IS} t_1) \sin(\Omega_I t_2) \cos(\pi J_{IS} t_2)$$

$$-I_x a_{IS} \cos(\Omega_S t_1) \cos(\pi J_{IS} t_1) \sin(\Omega_I t_2) \cos(\pi J_{IS} t_2)$$

# Heteronukleáris egyszeres-kvantum koherencia spektrum

## HSQC = Heteronuclear Single-Quantum Coherence

$1,1J \sim 90\text{Hz}$



## Fontosabb gondolati lépések egy NMR-pulzusszekvencia esetén:

*1. Koherencia generálás*

*2. Koherencia átadás és/vagy keverés (mixing)*

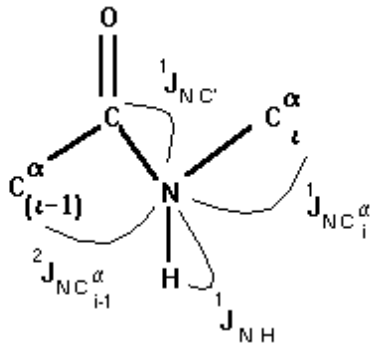
- kötésen keresztüli koherencia átadás
- téren át történő mágnesezettség átadása
- heteronukleáris koherencia átadás

*3. Koherencia kiválasztása*

- "phase cycling"
- "pulsed field gradient"

*4. Detektálás*

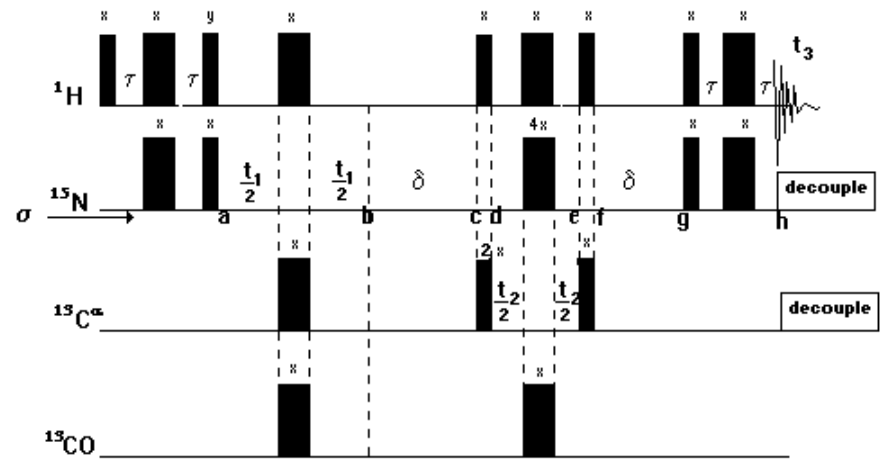
# Az alap HNCa pulzusszekvencia



$$^1J_{\text{NH}} = 91 \text{ Hz}$$

$$^2J_{\text{NC}^\alpha_{i-1}} = 7 \text{ Hz}$$

$$^1J_{\text{NC}^\alpha_i} = 10 \text{ Hz}$$



## A. modul (ellentétes fázisú koherencia előállítása az N-en)

$$\sigma[0] \quad \text{"az első INEPT modul kezdete"} \quad +\mathbf{H}_z$$

$$\sigma[a] \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad -2\mathbf{H}_z\mathbf{N}_y$$

## B. modul (N frekvencia jelölése)

$$\sigma[a] \quad \text{" } t_1 \text{ kezdetén " } \quad -2\mathbf{H}_z\mathbf{N}_y$$

$$\sigma[b] \quad \text{" } t_1 \text{ végén" } \quad +2\mathbf{H}_z\mathbf{N}_y \cos(\Omega_N t_1)$$

## C. modul (N-ről a koherenciát átadjuk a C $\alpha$ (k)-ra)

$$\sigma[b] \quad \text{"a } \delta \text{ periódus elején" } \quad +2\mathbf{H}_z\mathbf{N}_y \cos(\Omega_N t_1)$$

$$\sigma[c] \quad \text{"a } \delta \text{ periódus végén" } \quad -4\mathbf{H}_z\mathbf{N}_x\mathbf{C}_z \cos(\Omega_N t_1)$$

## D. modul (a többszörös-kvantum koherencia előállítása)

$$\sigma[c] \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad -4\mathbf{H}_z\mathbf{N}_x\mathbf{C}_z \cos(\Omega_N t_1)$$

$$\sigma[d] \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad -4\mathbf{H}_y\mathbf{N}_x\mathbf{C}_y \cos(\Omega_N t_1)$$

**E. modul ( a  $C\alpha$ -k frekvencia jelölése)**

$\sigma[d]$  "  $t_2$  kezdetén "

$$-4H_y I_x C_y \cos(\Omega_N t_1)$$

$\sigma[e]$  "  $t_2$  végén "

$$-4H_y I_x C_y \cos(\Omega_N t_1) \cos(\Omega_{C\alpha} t_2)$$

**F. modul (visszaalakítjuk a többszörös-kvantum coherenciát ellentétes fázisú  $N$  koherenciává)**

$\sigma[e]$

$$-4H_y I_x C_y \cos(\Omega_N t_1) \cos(\Omega_{C\alpha} t_2)$$

$\sigma[f]$

$$-4H_z I_x C_z \cos(\Omega_N t_1) \cos(\Omega_{C\alpha} t_2)$$

**G. modul ("rephasing" a második  $\delta$  idő alatt)**

$\sigma[f]$

$$-4H_z I_x C_z \cos(\Omega_N t_1) \cos(\Omega_{C\alpha} t_2)$$

$\sigma[g]$

$$-2H_z I_y \cos(\Omega_N t_1) \cos(\Omega_{C\alpha} t_2)$$

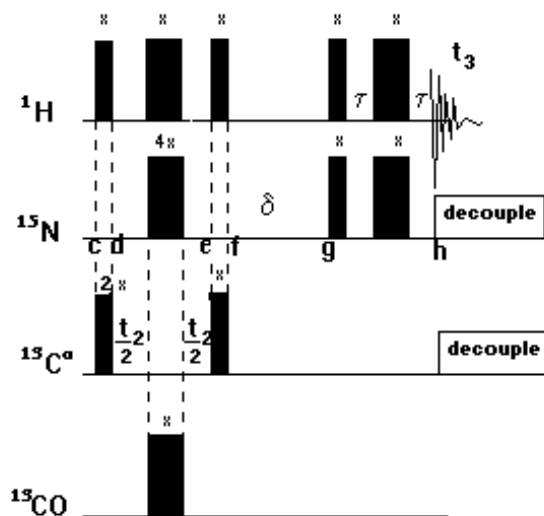
**H. modul (záró reverz-INEPT)**

$\sigma[g]$

$$-2H_z I_y \cos(\Omega_N t_1) \cos(\Omega_{C\alpha} t_2)$$

$\sigma[h]$  " a végén "

$$-H_x \cos(\Omega_N t_1) \cos(\Omega_{C\alpha} t_2)$$



**Detektálás:**  $-H_x \cos(\Omega_N t_1) \cos(\Omega_{C\alpha} t_2) \cos(\Omega_H t_3)$