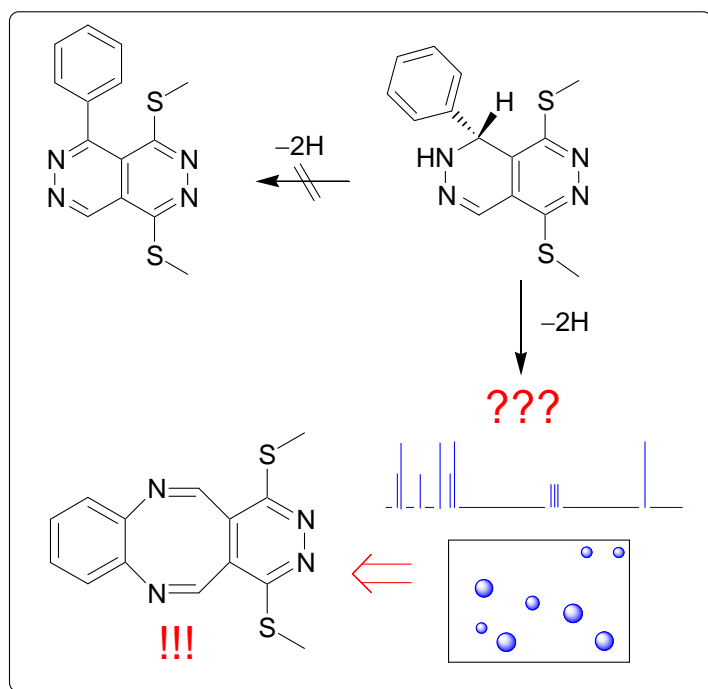


Szerves kémiai problémák megoldása NMR spektroszkópiával



ETR-kód: kvvn9103
Kredit: 2
Oktató: Csámpai Antal

Tematika

1. A magspin és a mag mágneses momentum fogalma, alapjelenség.
2. Mágneses energiaszintek, betöltöttség, gerjesztés, relaxációs folyamatok.
3. Larmor precesszió, detektálás, a spektrumok megjelenése, a Fourier transzformáció alapelve.
4. Kémiai környezet, árnyékolási tényező, referenciaanyagok, kémiai eltolódást meghatározó elektron- és térszerkezeti tényezők és egyéb paraméterek hatása az ^1H -, ^{13}C -és ^{15}N -rezonancia eltolódásokra.
5. Egyes funkciós csoportokra jellemző szerkezet-reaktivitás összefüggések tükröződése a kémiai eltolódás értékekben. Az ^1H -, és ^{13}C - eltolódások, valamint az aromás elektrofil- és nukleofil szubsztitúciókban mutatott reaktivitás közötti összefüggések.
6. Anizotróp szomszédcsoport effektus és az oldószerek hatása. Ezek alkalmazása szerkezeti problémák megoldása.
7. Disszociálisan protonok és cserefolyamatok.
8. A spin-spin csatolás jelensége, homo- és heteronukleáris csatolások, a csatolási állandók nagyságát megszabó szerkezeti tényezők (közvetítő kötések száma, térbeli elrendeződése, Karplus összefüggés).
9. Egyszerűbb spinrendszerek spektrális paramétereinek meghatározása, elsőrendű spektrumok értelmezése csatolási diagrammokkal.
10. NMR spektrumok és a molekulaszimmetria. Homotóp, enantiotóp és diasztereotóp csoportok.
11. Shiftreagens alkalmazása, optikai tisztaság meghatározása.
12. Nukleáris Overhauser effektus (NOE), térszerkezetiproblémák megoldása.
13. Molekuladinamikai jelenségek (kötés körüli gátolt rotáció, konformációs mozgások, gyűrűinverzió) vizsgálata hőmérsékletfüggő NMR mérésekkel, aktiválási paraméterek meghatározása.

14. Pulzusszekvenciákkal kapott 1D- és 2D spektrumokból (D-NOE, DEPT, COSY, HSQC, HMBC) levonható szerkezeti következtetések bemutatása egyszerű példákon.
15. Egyszerű szerkezetek meghatározásának bemutatása több spektrum kiértékelésével és összevetésével.
16. Párhuzamos reakciókban képződő regio- és sztereoizomer vegyületek szerkezetének a meghatározása tanult módszerek kombinált alkalmazásával.
17. Többlépéses reakciókkal kapcsolatos feladatok megoldása kémiai megfontolások és spektroszkópai szerkezetmeghatározás segítségével

Az órai foglalkozások előadás-, és amennyire lehetséges, interaktív jellegűek.
Az feladatok megoldásán alapuló számonkérés írásbeli formában történik.