

## Spektroszkópai módszerek a kémiai szerkezetfelderítésben

NMR spektroszkópia alapelve. NMR spektrális paraméterek: kémiai eltolódás, spin-spin csatolás és szerkezeti alkalmazásai. Kétdimenziós (2D) NMR módszerek: proton-proton skaláris korreláció (COSY-, TOCSY-kísérlet), dipoláris korreláció (NOESY-, ROESY-kísérlet), heteronukleáris korreláció (HSQC, HMBC) vizsgálata. NMR jelhozzárendelés módszerei. Kiroptikai spektroszkópia, cirkuláris dikroizmus, cirkuláris kettőstörés, optikai forgatás, optikai rotációs diszperzió, abszolút konfiguráció meghatározása kiroptikai módszerekkel. UV-látható és infravörös spektroszkópia alapelve és alkalmazási lehetőségeik, funkciós csoportok karakterisztikus IR alaprengései.

Tömegspektrometria: tömegspektrométerek felépítése és a mérés elve. Különböző ionizációs módszerek, ionok detektálása, érzékenység, felbontóképesség, tömegtartomány. Szerves molekulák fontosabb fragmentációs folyamatai; jelhozzárendelés, szerkezeti információ nyerése a tömegspektrumok alapján.

Kémiai szerkezetfelderítés spektroszkópai módszerek kombinált felhasználásával.

- Irodalom:**
1. Tóth Gábor, Balázs Barbara: Szerves vegyületek szerkezetfelderítése, Műegyetem Kiadó, 2005
  2. L. D. Field, S. Sternhell, J. R. Kalman, Organic Structures from Spectra, Wiley
  3. P. J. Hore, Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó, 2004
  4. Hollósi Miklós, Laczkó Ilona, Majer Zsuzsa, A sztereokémia és kiroptikai spektroszkópia alapjai, Nemzeti Tankönyvkiadó, 2004.