

A modern NMR módszerek elmélete

A kurzus részletes tematikája:

A tantárgy keretében a folyadékfázisú mágneses magrezonancia spektroszkópia alapelveit és a modern alkalmazások elvi alapjait tanítjuk. A modern NMR módszerek kiválóan alkalmazhatók biológiailag aktív molekulák és biopolimerek atomi felbontású szerkezetvizsgálatára és kölcsönhatásaik tanulmányozására.

Az NMR jelenség fizikai alapjai. Kémiai eltolódás és spin-spin csatolás. Az impulzus-Fourier elv. Kísérletek leírása vektor és szorzat-operátor modellel. Mágneszettségi trajektóriák. Az alapkísérletek magyarázata sűrűség mátrix módszerrel és szorzat operátorokkal. Impulzus NMR kísérletek építőkövei: RF impulzusok, gradiens impulzusok, szelektív impulzusok, fázisprogramok, spin-echo, polarizáció transzfer. Két dimenziós (2D-NMR) szerkezetvizsgáló módszerek: COSY, TOCSY, NOESY, HSQC, HMQC, HMBC. Spin-lock módszerek: ROESY és TOCSY. Folyadékfázisú relaxációs jelenségek: spin-spin, spin-rács relaxáció és mag-Overhauser hatás (NOE), a kémiai csere jelensége. Kísérletek impulzus programjainak tervezése Bruker topspin rendszerben. A MATLAB matematikai program NMR alkalmazásai.

Ajánlott irodalom:

P.J. Hore, Mágneses Magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004.

ISBN 963 19 4426 3

J. N. S. Evans, Biomolecular NMR Spectroscopy, Oxford University Press, 1995,

ISBN 0 19 854766 8

Batta Gyula, A modern NMR módszerek elméleti alapjai (pdf jegyzet, 2001)