

Relaxációs módszerek a kémiában

A kurzus részletes tematikája:

- 1. hét:** Reverzibilis kémiai reakciók. A kémiai egyensúly gyors megzavarása. A relaxáció detektálása, emissziós spektroszkópiák időskálái. A mágneses magrezonancia (NMR) kulcsszerepe a relaxációs időállandók alapján. A kémiai egyensúly frekvenciája.
- 2. hét:** Az NMR alapelvei. A mágnesség jelensége makroszkópikus jelenségekben. A mágnesség kvantumkémiái alapjai. Az NMR jelenség.
- 3. hét:** Az NMR alkalmazásai. Az NMR gyakorlata, FT NMR. A kémiai eltolódás spektrum és információtartalma. Multinukleáris NMR és példái.
- 4. hét:** A relaxáció. Relaxáció eredete és típusai az NMR spektroszkópiában. A relaxációs időállandók meghatározása. Impulzus szekvenciák.
- 5. hét:** Gyakorlat I. Az alapvető NMR paraméterek megismerése és meghatározása a gyakorlatban, a készülék kezelésének alapjai.
- 6. hét:** Az egyensúlyi reakciók fogalma és alapvető törvényei. A cserefolyamatok és transzverzális relaxáció kapcsolata. Jelalak elemzés, spektrumszimuláció.
- 7. hét:** A longitudinális relaxáció. A szelektív gerjesztései technikák. Dinamikus NMR a longitudinális NMR időskálán.
- 8. hét:** Gyakorlat II. Relaxációs időállandók meghatározása.
- 9. hét:** A kétdimenziós NMR alapjai. A 2D NMR koncepciója alapvető típusai. Cserespektroszkópia, EXSY, NOESY.
- 10. hét:** Dinamikus NMR példák. Példák az irodalomból.
- 11. hét:** Mérések gradiens térben. A reverzibilis diffúzió elmélete. A DOSY.
- 12. hét:** Ritkább technikák A kisterű NMR relaxometria, NMR krioporozimetra. Porózus anyagok vizsgálata.
- 13. hét:** Egyéb relaxációs technikák. Önálló irodalomi feldolgozás.