



MISKOLCI EGYETEM
Anyag- és Vegyészmérnöki Kar
**Kerpely Antal Anyagtudományok és -
technológiák Doktori Iskola**



NMR spektroszkópia alkalmazása az anyagtudományban

Dr. Mucsi Zoltán

TANTÁRGYLEÍRÁS

2025.

NMR spektroszkópia alkalmazása az anyagtudományban

Dr. Mucsi Zoltán

Tantárgy jegyzője

Dr. Mucsi Zoltán, egyetemi tanár, Kémia Intézet.

mail: zoltan.mucsi@uni-miskolc.hu, tel: 20/441-6971,

<https://ki.uni-miskolc.hu/munkatarsak/dr-mucsi-zoltan/>

Tantárgy célcsoportja

A tárgy minden a Kerpely Doktori Iskola, de különösen a kémia tématerület hallgatójának ajánlott.

Tantárgy nyelve

Magyar vagy angol.

Tantárgy célja

A tantárgy célja, hogy elmélyült és gyakorlatias ismereteket nyújtson a magmágneses rezonancia (NMR) spektroszkópia elméleti alapjairól, mérési technikáiról és gyakorlati alkalmazásairól a vegyész hallgatók számára. A kurzus során a hallgatók megismerik az NMR spektroszkópia alapelveit, a spektrumok értelmezésének módszertanát, valamint a szerkezetazonosításban, konformációanalízisben, dinamikai vizsgálatokban és kvantitatív analízisben betöltött szerepét. Kiemelt figyelmet kap a proton- és szén-NMR, valamint a modern 2D technikák és többmagos mérések alkalmazása. A tantárgy célja továbbá, hogy a hallgatók képessé váljanak önálló NMR-mérési stratégiák kidolgozására és a kapott adatok kritikus értelmezésére saját kutatásaik során.

Tantárgy módszertana

Nagyobb hallgatói létszám esetén a tananyag kontaktórák keretében kerül átadásra, előadások és interaktív gyakorlatok formájában. Kis létszám (1–2 fő) esetén a képzés egyénre szabott módon történik. A hallgató három tematikus blokkban kapja meg az elsajátítandó tananyagot, amelyek az NMR spektroszkópia alapjait, spektrumértelmezési módszereit, valamint haladó alkalmazásait fedik le. Minden blokkhoz kapcsolódóan ajánlott irodalom és ellenőrző kérdések kerülnek átadásra. A kurzus során néhány alkalommal találkozunk konzultációra, ahol a hallgató válaszait közösen átbeszéljük, tisztázzuk a felmerült kérdéseket, és szóban is számon kérem az adott tém részek legfontosabb összefüggéseit.

Tantárgy tematikája

1. Bevezetés és elméleti alapok

Ez a blokk az NMR spektroszkópia fizikai-kémiai alapjait ismerteti, amelyek elengedhetetlenek a spektrumok megértéséhez. A hallgatók megismerik a magspin viselkedését mágneses térben, a rezonancia feltételeit és az energiaátmenetek hátterét.

- Az NMR spektroszkópia szerepe a modern kémiában és biomolekuláris kutatásban

- Atommagok mágneses tulajdonságai, a magspin fogalma
- A mágneses tér és a Larmor-precesszió
- A mágneses rezonancia feltétele, energiakülönbség és populációeloszlás
- Relaxációs folyamatok: T_1 és T_2 relaxáció jelentősége
- Fourier-transzformáció és pulzusszekvenciák alapjai

2. Spektroszkópiai alapelvek és mérési technikák

A második modul a gyakorlati mérési paraméterekre és azok értelmezésére fókuszál. A hallgatók elsajátítják az egy- és többdimenziós NMR technikák alapjait, valamint a különböző atommagok vizsgálatához szükséges speciális ismereteket.

- ^1H és ^{13}C NMR: kémiai eltolódás, spin–spin kapcsolódás (J-kapcsolat)
- NMR spektrumok fő jellemzői: multiplicitás, integráció, finomszerkezet
- Oldószerhatások, referenciaanyagok, belső és külső standardok
- 2D NMR technikák: COSY, HSQC, HMBC elvi áttekintése
- Többmagos NMR (pl. ^{19}F , ^{31}P , ^{15}N) alkalmazása speciális rendszerekben
- Mintaelőkészítés, koncentráció, pH és hőmérséklet hatásai

3. Spektrumelemzés és gyakorlati alkalmazás

A harmadik rész célja az NMR spektrumok értelmezésének készség szintű elsajátítása. A hallgatók valós példákon keresztül gyakorolják a szerkezetazonosítást, valamint betekintést nyernek a kvantitatív és dinamikai alkalmazásokba is.

- Egyszerű szerves molekulák szerkezetazonosítása ^1H és ^{13}C NMR alapján
- 2D NMR spektrumok értelmezésének alapjai
- Konformáció és dinamikai folyamatok vizsgálata
- Kvantitatív NMR (qNMR): módszertan és alkalmazások
- Spektrumok értelmezése szoftveres támogatással (pl. MestReNova, TopSpin)
- Esettanulmányok: kutatási vagy ipari példák részletes elemzése

Ellenőrző kérdések:

1. Mi az NMR spektroszkópia fizikai alapja, és milyen feltételek szükségesek a rezonanciához?
2. Mi a kémiai eltolódás (δ), és milyen tényezők befolyásolják annak értékét?
3. Mi a különbség a T_1 és T_2 relaxációs idő között, és hogyan hatnak ezek a spektrum minőségére?
4. Hogyan értelmezhető egy ^1H NMR spektrum multiplicitása és mi az $n+1$ szabály jelentősége?
5. Mi az a spin–spin csatolás (J-kapcsolat), és hogyan olvasható ki a spektrumból a csatolási állandó?
6. Ismertesse a COSY és a HSQC technikák alapelvét és azok információ tartalmát!
7. Mely atommagokat vizsgálhatjuk még ^1H és ^{13}C mellett, és milyen előnyökkel jár ezek alkalmazása?
8. Milyen lépésekből áll a mintaelőkészítés NMR méréshez, és miért fontos a minta koncentrációja?
9. Hogyan történik egy ismeretlen szerves vegyület szerkezetazonosítása ^1H és ^{13}C spektrum alapján?
10. Mi a kvantitatív NMR (qNMR) lényege, és milyen feltételek mellett végezhető megbízhatóan?

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalmak

Magyar nyelvű irodalom:

Kéri György – Mády Gyula – Szilágyi László: Szerves kémiai spektroszkópia
Semmelweis Kiadó, Budapest

Hollósi Miklós (szerk.): A biomolekulák spektroszkópiája, Semmelweis Kiadó
Előadások jegyzetei / oktató által összeállított tananyag
Angol nyelvű irodalom:

T.D.W. Claridge: *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*
Elsevier, 3rd Edition (2009 vagy újabb)

David G. Morris: *NMR Spectroscopy in Practice: From Basics to Applications*
Wiley-VCH, 2010

James Keeler: *Understanding NMR Spectroscopy*
Wiley, 2nd Edition (2010)

Jeremy K.M. Sanders: *Modern NMR Spectroscopy – A Guide for Chemists*
Oxford University Press

William Kemp: *NMR in Chemistry: A Multinuclear Introduction*
Macmillan, 1986

Tantárgy teljesítése, számonkérés

Az ellenőrző kérdésekre adott helyes válaszokat követően szóbeli vizsga.

Tantárgyhoz kapcsolódó komplex vizsga kérdések

1. Ismertesse részletesen az NMR spektroszkópia fizikai alapjait, különös tekintettel a spin–mágneses tér kölcsönhatásra, a rezonanciára és a relaxációs folyamatokra. Hogyan befolyásolják ezek a spektrum felbontását és jelintenzitását?
2. Mutassa be és hasonlítsa össze a legfontosabb 1D és 2D NMR technikákat (^1H , ^{13}C , COSY, HSQC, HMBC)! Milyen szerkezeti információkat nyerhetünk ezekből, és milyen esetekben érdemes az egyes technikákat alkalmazni?
3. Részletesen ismertesse a spin–spin csatolás (J-kapcsolat) jelenségét. Hogyan lehet a csatolási állandókból szerkezeti információt nyerni? Milyen különbségek figyelhetők meg elsőrendű és nem elsőrendű rendszerekben?
4. Vegyen például egy egyszerű szerves molekulát (pl. etil-acetát vagy benzil-alkohol), és elemezze a ^1H és ^{13}C NMR spektrumát. Magyarázza el a spektrum minden jellemzőjét: kémiai eltolódás, integrálás, multiplicitás, J-értékek.
5. Fejtse ki a kvantitatív NMR (qNMR) elvét, előnyeit és tipikus alkalmazásait. Milyen követelményeknek kell megfelelnie egy megbízható qNMR mérésnek? Hogyan történik a koncentrációk számítása?
6. Többmagos NMR spektroszkópia: ismertesse a ^{19}F , ^{31}P vagy ^{15}N NMR alapjait és jelentőségét. Milyen szempontok különböztetik meg ezeket a technikákat a ^1H vagy ^{13}C NMR-től elméleti és gyakorlati oldalról?
7. Milyen hatással van a minta fizikai és kémiai tulajdonsága (koncentráció, oldószer, hőmérséklet, pH stb.) az NMR spektrumra? Hozzon konkrét példákat és magyarázza el a tapasztalható változásokat.
8. Ismertesse a Fourier-transzformáció szerepét az NMR spektroszkópiában. Hogyan alakul ki az időtartományú jelből a frekvenciatartományú spektrum, és milyen előnyökkel jár ez a technika?

9. Elemezze az NMR szerepét a dinamikus kémiai folyamatok, például konformációs egyensúlyok, kémiai cserefolyamatok vagy reakciókinetikák vizsgálatában. Milyen típusú mérések és paraméterek szolgáltatnak információt ezekről?

10. Adjon kritikai áttekintést az NMR spektroszkópia jelenlegi és jövőbeli szerepéről a vegyészeti és élettudományi kutatásokban. Milyen technológiai vagy módszertani fejlesztések láthatók, és hogyan javíthatják ezek az analitikai teljesítményt?