

A TANTÁRGY ADATLAPJA

1. A képzési program adatai

1.1 Felsőoktatási intézmény	Babes-Bolyai Tudományegyetem
1.2 Kar	Kémia és Vegyészmérnöki Kar
1.3 Intézet	Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézet
1.4 Szakterület	Kémia
1.5 Képzési szint	Magiszteri képzés
1.6 Szak / Képesítés	Technici Moderne de Sinteză în Chimie (TMSC) Korszerű technikák a kémiai szintézisben

2. A tantárgy adatai

2.1 A tantárgy neve		Haladó szintű szerkezet analízis					
A tantárgy kódja		CMM6641					
2.2 Az előadásért felelős tanár neve				Lect. dr. Tamas Lovasz, Lect. dr. Attila Kun			
2.3 A szemináriumért felelős tanár neve				Lector dr. Lovász Tamás			
2.4 Tanulmányi év	II	2.5 Félév	IV	2.6. Értékelés módja	E	2.7 Tantárgy típusa	Választható, DS

3. Teljes becsült idő (az oktatási tevékenység féléves óraszama)

3.1 Heti óraszám	4	melyből: 3.2 előadás	2	3.3 szeminárium/labor	2
3.4 Tantervben szereplő össz-óraszám	56	melyből: 3.5 előadás	28	3.6 szeminárium/labor	28
A tanulmányi idő elosztása:					óra
A tankönyv, a jegyzet, a szakirodalom vagy saját jegyzetek tanulmányozása					34
Könyvtárban, elektronikus adatbázisokban vagy terepen való további tájékozódás					10
Szemináriumok / laborok, házi feladatok, portfóliók, referátumok, esszék kidolgozása					18
Egyéni készségfejlesztés (tutorálás)					3
Vizsgák					4
Más tevékenységek:					-
3.7 Egyéni munka össz-óraszama	69				
3.8 A félév össz-óraszama	125				
3.9 Kreditszám	5				

4. Előfeltételek (ha vannak)

4.1 Tantervi	• nincs
4.2 Kompetenciabeli	• nincs

5. Feltételek (ha vannak)

5.1 Az előadás lebonyolításának feltételei	<ul style="list-style-type: none"> Az interaktív részvételt ösztönzése A hallgatók hozzáférhetnek az adatbázisokhoz (egyetemi, valamint a központi könyvtár által előfizetett szakirodalmi adatbázisok) Az előadásokhoz szükséges technikai eszközök (számítógép, szükséges szoftver, video kivetítő) A hallgatók kikapcsolt mobiltelefonnal jelenjenek meg az előadáson
5.2 A szeminárium / labor lebonyolításának feltételei	<ul style="list-style-type: none"> Kötelező a hallgatói részvétel a szemináriumon. Elvárt a pontos megjelenés. A hallgatók kikapcsolt mobiltelefonnal jelenjenek meg a szemináriumon. Szükséges az előző szemináriumokon feltüntetett bibliográfia használata.

6. Elsajátítandó jellemző kompetenciák

Szakmai kompetenciák	<ul style="list-style-type: none"> A szerves, szervetlen és koordinatív vegyületek szerkezetvizsgálati módszereihez tartozó elméleti alapok és fizikai jelenségek ismerte (IR, NMR, ESR, röntgen diffrakciós kristályszerkezetvizsgálat, MS tömegspektrometria, CD spektroszkópia). Modern szerkezetvizsgálati módszerek helyes használata, a kapott adatok feldolgozása elsajátítása és felhasználása: szerves, szervetlen és koordinatív vegyületek szerkezet-felderítésében Az általános, valamint szerves kémiai ismeretek felhasználása a spektroszkópai módszerekkel kapott adatok elemzésében. Kreatív megoldások kidolgozása és alkalmazása szerves vegyületek szerkezet-meghatározására
Transzverzális kompetenciák	<ul style="list-style-type: none"> A szakmai feladatok megoldása a munkacsoporton belül meghatározott általános célokkal összhangban, amelyhez fontos: az elemző gondolkodás, az alkalmazkodóképesség, a rugalmasság és a csapat tagokkal való együttműködés Információ és dokumentáció magyar, román és angol nyelven, modern információs és kommunikációs módszerek felhasználásával (adatbázisokban való keresés), a javasolt bibliográfia felhasználásával.

7. A tantárgy célkitűzései (az elsajátítandó jellemző kompetenciák alapján)

7.1 A tantárgy általános célkitűzése	Modern spektroszkópai módszerek megismerése, alkalmazásaik elsajátítása és felhasználása: szerves, szervetlen és koordinációs vegyületek szerkezet meghatározására.
7.2 A tantárgy sajátos célkitűzései	<ul style="list-style-type: none"> A szerves, szervetlen és koordinatív vegyületek szerkezetvizsgálati módszereihez tartozó elméleti alapok és fizikai jelenségek megismerése (IR, NMR, ESR, röntgen diffrakciós kristályszerkezetvizsgálat, MS tömegspektrometria, CD spektroszkópia). Modern szerkezetvizsgálati módszerek helyes használatának, valamint a kapott adatok feldolgozásának elsajátítása és felhasználása: szerves, szervetlen és koordinatív vegyületek szerkezet-felderítésében (IR, NMR, ESR, röntgen diffrakciós kristályszerkezetvizsgálat, MS tömegspektrometria, CD spektroszkópia). Az általános, valamint szerves kémiai ismeretek felhasználása a spektroszkópai módszerekkel kapott adatok elemzésében.

8. A tantárgy tartalma

8.1 Előadás	Didaktikai módszerek	Megjegyzések
8.1.1 Tömegspektrometria-TS (I) A módszer fizikai alapelve, a készülék működési elve, fragmentációs szabályok.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.2. Tömegspektrometria-TS (II) HRMS technikák. MS alkalmazása fehérjék szerkezetének vizsgálatában.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.3. IR (I) spektroszkópia Kiválasztási szabályok, a rezgések típusai, szerkezeti tényezők, amelyek befolyásolják a csoportokra jellemző frekvenciákat.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.4. IR (II) spektroszkópia IR spektroszkópia alkalmazása a katalitikus folyamatok vizsgálatában. <i>In situ</i> IR spektroszkópia, felületi infravörös spektroszkópia.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.5. Kiroptikai spektroszkópia:	Előadás, leírás,	Előadás (2 óra)

Polarimetria, Optikai rotációs diszperzió (ORD), Cirkuláris dikroizmus (CD), Vibrációs cirkuláris dikroizmus (VCD)	magyarázat, beszélgetés	A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.6. Kiroptikai spektroszkópia II. (ORD, ECD, VCD):	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.7. Az ESR spektroszkópia (I) Alapelvek, a készülék működési elve. ESR spektrumok kiértékelése.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.8. Az ESR spektroszkópia (II) Az ESR spektroszkópia alkalmazása koordinációs vegyületek szerkezetének tanulmányozásában, gyökök és metalloproteinek szerkezet-vizsgálatában.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.9. Nukleáris mágneses rezonancia spektroszkópia - Kiválasztási szabályok, a készülék működési elve, spektrális paraméterek.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.10. Modern 1D és 2D NMR technikák - Homonukleáris rendszerek: COSY; TOCSY; NOE, NOESY. Biokémiai alkalmazások.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.11. 2D NMR technikák - Heteronukleáris rendszerek: HETCOR, HMQC, HMBC, HSQC	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.12. NMR-módszerek alkalmazása a polimerek szerkezetvizsgálatában. Szilárd fázisú NMR technikák.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.13. Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat (I) Kristályrácsok. Fizikai elvek. Determinációs együttható. A készülék leírása.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.14. Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat (II) A kristályszerkezet meghatározása. A fázis probléma megoldása. Számítási módszerek.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.

Ajánlott irodalom

Kötelező:

1. P. J. Hore. Mágneses Magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004
2. L. David, C. Cristea, O. Cozar, L. Găină, "Identificarea structurii moleculare prin metode spectroscopice", Editura Presa Universitară Clujeană, 2004
3. M. J. N. Junk, "Assessing the Functional Structure of Molecular Transporters by EPR Spectroscopy", Springer Theses, Springer-Verlag, 2012
4. M. Ikeya, "New Applications of Electron Spin Resonance", World Scientific, 1993
5. H. Friebolin, Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy: 4th Ed., Wiley-VCH, Weinheim. 2005
6. W. Massa, Crystal Structure Determination, Springer, 2004

Választható:

1. J. Bodis, A szerves kémia alapjai, Editura Presa Universitară Clujeană, 2006
2. I. Pogany, M. Banciu, "Metode fizice în chimia organică" Ed. Stiințifică, București 1972.
3. S. Mager, «Analiza Structurală Organică» Ed St. Enciclopedică, București 1979.
4. B. Stuart „IR spectroscopy fundamentals and applications” John Wiley and Sons, 2004
5. K. Nakamoto, „Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds” John Wiley & Sons, 1986.
6. A. Bényei, V. Harmat, Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat, Debreceni Egyetem, 2013, (http://www.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop412A/2011_0025_vegy_1/ch11s04.html)

Szeminárium	Didaktikai módszerek	Megjegyzések
8.2.1. Tömegspektrometria - HRMS bemutatása, adatfeldolgozás	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.2 Tömegspektrometria - tömegspektrumok kiértékelése	Példák megoldása, esettanulmány, spektrumok kiértékelése	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.3. IR spektrumok kiértékelése	Példák megoldása, esettanulmány, spektrumok kiértékelése	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.4. IR spektroszkópia alkalmazása a katalitikus folyamatok vizsgálata során - spektrumok kiértékelése	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.5. Egyes királis anyagok konfigurációjának meghatározása VCD spektroszkópiával I.	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.6. Egyes királis anyagok konfigurációjának meghatározása VCD spektroszkópiával II.	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.7. ESR spektroszkópia - a készülék bemutatása, az adatfeldolgozáshoz használt program bemutatása	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.8. ESR spektrumok kiértékelése: szerves gyökök, koordinációs vegyületek, metalloproteinek	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.9. NMR-spektrumok kiértékelése: ^1H , ^{13}C , ^{31}P .	Példák megoldása, esettanulmány, spektrumok kiértékelése	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.10. Szilárd fázisú NMR.	Példák megoldása, esettanulmány, spektrumok kiértékelése	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.11. 2D-NMR-spektrumok kiértékelése: ^1H - ^1H COSY TOCSY; NOE, NOESY	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.12. 2D-NMR-spektrumok kiértékelése: ^1H - ^{13}C HMQC, ^1H - ^{13}C HMBC	Példák megoldása, esettanulmány, spektrumok kiértékelése	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.13. Krisztallográfiai adatfeldolgozó programok használata. Kristályrácsok.	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	2 óra/ laboratórium, szeminárium
8.2.14. A kristályszerkezet meghatározása. Számítási módszerek.	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása, esettanulmány	2 óra/ laboratórium, szeminárium
Ajánlott irodalom 1. P. J. Hore. Mágneses Magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004 2. A. T. Balaban, M. Banciu, I. Pogany, "Aplicatii ale metodelor fizice în chimia organică", Ed. Stiințifică și Enciclopedică, București, 1983; 3. L. D. Field, S. Sternhell, J.R. Kalman, „Organic structures from spectra” John Wiley & Sons, 2007; 4. E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl, W. Simon, Tables of Spectral Data for Structure Determination of Organic Compounds, Second edition, Springer-Verlag, 1989. 5. M. Ikeya, "New Applications of Electron Spin Resonance", World Scientific, 1993 6. E. Zolotoyabko, "Basic Concepts of X-Ray Diffraction", Wiley-VCH, 2014		

9. Az episztemikus közösségek képviselői, a szakmai egyesületek és a szakterület reprezentatív munkáltatói elvárásainak összhangba hozása a tantárgy tartalmával.

- Az összetett struktúrájú szerves vegyületek szerkezetvizsgálatával (természetes vegyületek, gyógyszerek, színezékek, aromaanyagok, peszticidek stb.) kapcsolatos fogalmak elsajátításával, valamint a mérési módszerek megismerésével, az adatok feldolgozásával a hallgatók megszerzik a Gr1a1 - RNCIS –ben szereplő lehetséges foglalkozásokhoz szükséges részleges kompetenciákat, valamint tudásanyagot. Ezek felhasználásával megfelelnek a munkaadók igényeinek a termelés területén.
- A tudományág tartalma hasznos a karrierfejlesztésben, a tudományos karrier (doktori fokozat, kutatás) irányában is.

10. Értékelés

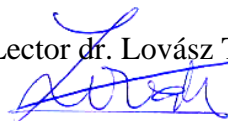
Tevékenység típusa	10.1 Értékelési kritériumok	10.2 Értékelési módszerek	10.3 Aránya a végső jegyben
10.4 Előadás	Írásbeli vizsga. A minősítés 1-10. A vizsgán való részvétel feltétele, hogy a szemináriumon az összes óra legalább 90%-án jelenjen meg a hallgató.	A megfogalmazott kérdésekre adott válaszok. Feladatok megoldása (legalább 2 feladat).	60%
10.5 Szeminárium / Labor	A feladatok helyes megoldása. Az előadás és a szeminárium témaköreinek elsajátítása és megértése alapján A minősítés 1-10.	Feladatok megoldása.	40%
	Fogalmak és módszerek megfelelő alkalmazása. A szemináriumi tevékenység alapján. A minősítés 1-10.		
10.6 A teljesítmény minimum-követelményei			
<ul style="list-style-type: none">Fontosabb spektroszkópiás módszerek (IR, MRI, MS, RES, röntgendiffrakció) jellemző spektrális paramétereinek ismerete. Minimum 5-ös osztályzat elérése a szemináriumi feladatok esetében. Minimum 5-ös osztályzat elérése a vizsgán a javítókulcs pontozási útmutatója alapján.			

Kitöltés dátuma

11.04.2022

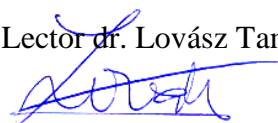
Előadás felelőse

Lector dr. Lovász Tamás



Szeminárium felelőse

Lector dr. Lovász Tamás



Lect. dr. Attila Kun

Az intézeti jóváhagyás dátuma

12.04.2022.

Intézetigazgató

