

VIZSGATÉTELEK

Szerkezetkutató módszerek elmélete, 2013/2014. tanév I. félév

1. Molekulaspektroszkópia és kvantumkémia: közelítések, energiaszintek, kiválasztási szabályok. Az elektromágneses spektrum. A kísérleti módszerek általános jellemzői. Sugárzás és anyag kölcsönhatása. Lézerhatás és a lézerek.
2. Forgási spektroszkópia I. Többatomos molekulák forgásának klasszikus mechanikája. Forgási pörgettyű típusok.
3. Forgási spektroszkópia II. Többatomos molekulák forgásának kvantummechanikája. Energiaszintek és kiválasztási szabályok.
4. Rezgési spektroszkópia I. Alapelvek. Többatomos molekulák rezgésének klasszikus leírása. Normálkoordináták.
5. Rezgési spektroszkópia II. Molekularezgések kvantummechanikai tárgyalása. A harmonikus lineáris oszcillátor. Szimmetria és a rezgési spektrum. Kiválasztási szabályok. Molekulamechanika.
6. Rezgési spektroszkópia III. Rezgési Raman spektroszkópia. Kiválasztási szabályok. Depolarizálhatóság.
7. Elektronspektroszkópia I. A látható-ultraibolya (UV-VIS) spektroszkópia alapelvei. Jablonski diagram. Kiválasztási szabályok.
8. Elektronspektroszkópia II. Elektronszínképek rezgési finomszerkezete (Franck-Condon elv). Radiatív és nem-radiatív folyamatok: belső konverzió, spinváltó átmenet, disszociáció és predisszociáció, fluoreszcencia és foszforeszcencia. A fotoelektron-spektroszkópia. A Koopmans-elv.
9. NMR. A magmágneses rezonancia-spektroszkópia módszerek általános elvei. Az NMR mérés. Kémiai eltolódás és spin-spin csatolás.

A vizsga beugró dolgozattal kezdődik. Itt legalább 50 (azaz ötven) %-ot kell elérni, ez alatt a vizsga elégtelen.

Budapest, 2013. december 2.

Császár Attila s.k.