**Kémiai anyagszerkezettan – Alapkérdések**

1. Írja fel a foton energiájának képletét!
2. Mit nevezünk Fraunhofer-vonalaknak, és mi a magyarázat a megjelenésükre?
3. Írja fel a stacionárius Schrödinger-egyenlet általános alakját!
4. Sorolja fel az elektromágneses hullám tartományait növekvő frekvencia szerint!
5. Milyen fő részekből épül fel az egy-utas UV-látható abszorpciós spektrométer?
6. Milyen összefüggés áll fenn az elektromágneses hullám frekvenciája és hullámhossza között?
7. Melyek az alapmennyiségek a klasszikus mechanikában, és melyek a kvantummechanikában?
8. Írja fel az impulzus képletét a klasszikus fizikában és operátorát a kvantummechanikában!
9. Mit nevezünk Hamilton-függvénynek a klasszikus fizikában és Hamilton-operátornak a kvantummechanikában?
10. Írja fel az impulzusmomentum képletét a klasszikus fizikában és operátorát a kvantummechanikában!
11. Írja fel a kinetikus energia képletét a klasszikus fizikában és operátorát a kvantummechanikában!
12. Mik a változói vannak az N részecskéből álló mikrorendszer állapotfüggvényének?
13. Milyen információt ad a mikrorendszert alkotó részecskék helyéről az állapotfüggvény?
14. Milyen esetben egyezik meg egy mikrorendszer állapotfüggvénye a Hamilton-operátorának sajátfüggvényével
15. Írja fel az átmeneti momentum képletét!
16. Miből származik a H-atom potenciális energiája? Írja fel a képletét!
17. Rajzolja fel a H-atom energiaszintjeinek sémáját!
18. Mit nevezünk a kvantummechanikában degenerált állapotoknak?
19. Milyen kvantumszámokkal jellemezhető a H-atom állapota? Milyen értékeket vehetnek fel ezek a kvantumszámok?
20. Írja fel a hidrogénatom pályaimpulzusmomentum-vektorának hosszára és z-irányú vetületére vonatkozó sajátértékeket!
21. Írja fel a mágneses momentum képletét!
22. Mit nevezünk Zeeman-effektusnak?
23. Írja fel az elektron spin-impulzusmomentumának hosszára és z-irányú vetületére vonatkozó sajátértékeket!
24. Mi a független részecske modell alapgondolata?
25. Mit nevezünk elektronhéjnak?
26. Írja fel az alapállapotú fluoratom (a fluor a 9. elem) elektron-konfigurációját!
27. Milyen vektormennyiségre utal a többelektronos atomokra használt „vektormodell” elnevezés?
28. Milyen értékeket vehet fel egy többelektronos atom eredő (pálya) impulzusmomentuma?
29. Milyen csoportkvantumszámok jellemzik az atomok elektronállapotait?
30. Milyen formában adjuk meg az atomoknak a vektormodell alapján adódó elektronállapotait?
31. Milyen állapotok tartoznak a He atom 1s12p1 gerjesztett konfigurációjához?
32. Hogyan keletkeznek a gerjesztett atomok a katódüreglámpában?
33. Írja fel az elektronokra vonatkozó Schrödinger-egyenletet a Born-Oppenheimer közelítés alapján!
34. Írja fel az atommagokra vonatkozó Schrödinger egyenletet a Born-Oppenheimer közelítés alapján!
35. Az elektromágneses sugárzás melyik tartományába esnek a molekulák forgási, rezgési, ill. elektrongerjesztési színképei?
36. Írja fel a molekula fotonabszorpciójának sebességi egyenletét!
37. Az optikai színképekben észlelt sávok frekvenciája és intenzitása hogyan kapcsolódik a Schrödinger-egyenlet megoldásával kapott sajátértékekhez és sajátfüggvényekhez?
38. Milyen tényezők határozzák meg a spektrumsávok szélességét? Melyik hatás domináns oldatminta, ill. kisnyomású gázminta esetén?
39. Mit nevezünk tehetetlenségi nyomatéknak?
40. Rajzolja fel egy kétatomos molekula forgási energiaszintjeinek sémáját!
41. Milyen kiválasztási szabályok vonatkoznak a kétatomos molekulák forgási színképére?
42. Hogyan osztályozzuk a többatomos molekulákat a fő tehetetlenségi nyomatékok alapján?
43. Milyen halmazállapotú mintákról veszik fel a forgási színképeket? (Indokolja meg a választ!)
44. Milyen információt kapunk a molekulaszerkezetről a forgási színkép alapján?
45. Miért használnak izotópszubsztituált származékokat a forgási spektroszkópiában?
46. Milyen kiválasztási szabályok vonatkoznak a kétatomos molekulák infravörös színképére?
47. Mit nevezünk az infravörös gázszínképekben P, Q, ill. R-sávoknak?
48. Mit nevezünk a spektroszkópiában normálrezgésnek? Hány normálrezgése van az N atomos molekulának?
49. Milyen belső koordinátákat használnak a molekulák rezgőmozgásának leírásához?
50. Mit nevezünk az infravörös spektroszkópiában karakterisztikus frekvenciáknak? Mi a jelentőségük a kémiai analízisben?
51. Mi a Fourier-transzformációs infravörös spektrométerek előnye a diszperziós készülékekhez képest?
52. Milyen lépésekből áll egy infravörös spektrum felvétele FT-IR spektrométerrel?
53. Milyen kvantummechanikai közelítések vezetnek a molekulapálya-modellhez?
54. Rajzoljon fel sematikusan egy molekulapálya-energiadiagramot!
55. Milyen alakja van a σ, a π, ill. az n-molekulapályáknak?
56. Mit nevezünk a molekulák szingulett és triplett állapotainak?
57. Milyen oldószerek használhatók az UV abszorpciós spektroszkópiában?
58. Milyen spinállapotok közötti átmenetből adódik a fluoreszcencia és a foszforeszcencia?
59. Mit nevezünk fluoreszcencia-kvantumhatásfoknak?
60. Mit nevezünk gerjesztési ill. emissziós fluoreszcencia-színképnek?
61. Miből adódik a fluoreszcenciás detektálás nagy érzékenysége?
62. Milyen mennyiségeket tüntetnek fel a CD és az ORD színképek tengelyein?
63. Rajzolja fel az abszorpció, a spontán emisszió és a stimulált emisszió sémáját!
64. Mit nevezünk inverz populációnak?
65. Rajzolja fel egy fluoreszkáló festékanyag Jablonski-diagramját!
66. Milyen folyamatokhoz rendelhetők a Raman-színképekben a Stokes, ill. az anti-Stokes sávok? A válaszhoz készítsen rajzot!
67. Milyen mennyiségeket tüntetnek fel a rezgési Raman-színképek tengelyein?
68. Milyen vizsgálatoknál előnyös a rezgési Raman-spektroszkópia az infravörös abszorpciós spektroszkópiához képest?
69. Folytonos, vagy impulzuslézert használunk fényforrásnak a Raman-spektrométerekben? Miért?
70. Milyen előnyei vannak a kétfoton-mikroszkópoknak a hagyományos fluoreszcencia-mikroszkópokhoz képest?
71. Hogyan változik a gerjesztett molekulák koncentrációja az időben, fényimpulzussal történő besugárzást követően?
72. Milyen mennyiségeket tüntetnek fel a villanófény-fotolízis készülékkel mért lecsengési görbe, ill. spektrum tengelyein?
73. Mi a mintára érkező két lézersugár szerepe a pumpa-próba kísérletben?
74. Mi jellemzi azokat az atommagokat, amelyekben a neutronok száma”bűvös szám”?
75. Írja fel a proton és a neutron spinjére vonatkozó képletet!
76. Milyen tagokból tevődik össze az atommagok Hamilton-operátora?
77. Milyen értékeket vehet fel az I magspin-kvantumszám, az atommag proton-, ill. neutronszámától függően?
78. Mik a feltételei annak, hogy valamely atommag Mössbauer aktív legyen?
79. Hogyan hangolják a mintára érkező sugárzás frekvenciáját a Mössbauer –spektrumok mérése során?
80. Mi a jellegzetessége a mágneses minták Mössbauer-színképének?
81. Írja fel az atommag impulzusmomentumára és mágneses momentumára vonatkozó képleteket (abszolút érték, z-irányú vetület)
82. Ábrázolja egy I = ½ magspin-kvantumszámú atommag energiáját a mágneses indukció függvényében!
83. Mit nevezünk az NMR spektroszkópiában kémiai árnyékolásnak?
84. Milyen mennyiségeket tüntetnek fel az NMR-színképek tengelyein?
85. Milyen jelalakja van a CH2-csoportnak a 13C spektrumban, figyelembe véve a C-H spin-spin csatolást?
86. Mit nevezünk I. rendű spektrumrészletnek?
87. Mire utal az, hogy az NMR-spektrométer 300 (500, 600, stb.) MHz-es?
88. Mi a szabad indukciós lecsengés (free induction decay, FID)?
89. Milyen oldószereket használunk az NMR spektroszkópiában?
90. Milyen okai vannak, hogy a szilárd minták spektrumaiban a jelek nagyságrendekkel szélesebbek, mint az oldatspektrumokban?
91. Milyen mennyiségeket tüntetnek fel a tömegspektrumok tengelyein?
92. Mit nevezünk a tömegspektrumban molekulacsúcsnak, ill. báziscsúcsnak?
93. Mit nevezünk a tömegspektroszkópiában fragmentációnak? Írjon fel rá példát!
94. Mik a tömegspektrométerek főbb egységei? (blokkdiagram)
95. Mit nevezünk a tömegspektrométer felbontásának?
96. Mi a lényege a MALDI ionizációs módszernek?
97. Mi a lényege az elektroporlasztásos ionizációnak?
98. Mi a működési elve a repülési idő tömegspektrométerek analizátorának?
99. Mi az alapelve a tömegspektrometriai módszerrel végzett elemanalízisnek?
100. Milyen alakú a (primitív) elemi cella? Milyen paraméterek jellemzik?
101. Milyen formában adják meg az atomi pozíciókat az elemi cellán belül?
102. A kristályszerkezet milyen jellemzőit tudjuk meghatározni röntgendiffrakciós kísérlettel, monokromatikus sugárzást használva, pormintát, ill. egykristály mintát vizsgálva?
103. Melyek a kristály-röntgendiffraktométer fő egységei?
104. Hogyan működik a röntgen-diffraktométerek sugárforrása?
105. Milyen mintatartót használnak a kristálydiffrakciós berendezésben?
106. Mit nevezünk a röntgendiffrakciós kísérletben szórási képnek (mintázatnak)?
107. Készítsen vázlatot a röntgensugár szóródásáról a kristályrácson!
108. Írja fel a Bragg-egyenletet!
109. Mik a Miller-indexek?
110. A kristálydiffrakciós kísérletben mért szórásmaximumok milyen jellemzőit használjuk fel az elemi cella paramétereinek, ill. az atomi pozícióknak a meghatározásához?
111. Mit ábrázolunk az elektronsűrűség térképen? Hogyan állapítható meg rajta az atommagok helye?