

Kémiai anyagszerkezetten – 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 (rajz)?
6. Milyen összefüggés áll fenn az elektromágneses hullám frekvenciája és hullámhossza között?
7. Melyek az alapszempontok 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 klasszikus fizikai 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 alapfeltevése?
25. Mit nevezünk elektronhéjnak?
26. Írja fel az alapállapotú fluoratom (a fluor a 9. elem) elektron-konfigurációját!
27. Milyen vektormennyiségre utal a többielektronos atomokra használt „vektormodell” elnevezés?
28. Milyen értékeket vehet fel egy többielektronos 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 $1s^1 2p^1$ 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 színeképei?
36. Írja fel a molekula fotonabszorpciójának sebességi egyenletét!
37. Az optikai színeképekben 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 színeképre?
42. Hogyan osztályozzuk a többatomos molekulákat a fő tehetetlenségi nyomatékok alapján?
43. Milyen halmazállapotú mintákról veszik fel a forgási színeképeket? (Indokolja meg a választ!)
44. Milyen információt kapunk a molekulaszervezetről a forgási színekép alapján?
45. Miért használnak izotópszubsztituált származékokat a forgási spektroszkópiában?
46. Milyen kiválasztási szabályok vonatkoznak a kétatomos molekulák infravörös színeképre?
47. Mit nevezünk az infravörös gázszíneképekben 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. Rajzolja fel az ATR-feltét vázlatát!
52. Rajzolja fel a Michealson-interferométer vázlatát!
53. Mi a Fourier-transzformációs infravörös spektrométerek előnye a diszperziós készülékekhez képest?
54. Milyen lépésekből áll egy infravörös spektrum felvétele FT-IR spektrométerrel?
55. Milyen kvantummechanikai közelítések vezetnek a molekulapálya-modellhez?
56. Rajzoljon fel sematikusan egy molekulapálya-energiadiagramot!

57. Milyen alakja van a σ , a π , ill. az n-molekulapályáknak?
58. Mit nevezünk a molekulák szingulett és triplett állapotainak?
59. Milyen oldószerek használhatók az UV abszorpciós spektroszkópiában?
60. Milyen spinállapotok közötti átmenetből adódik a fluoreszcencia és a foszforeszcencia?
61. Mit nevezünk fluoreszcencia-kvantumhatásfoknak?
62. Mit nevezünk gerjesztési ill. emissziós fluoreszcencia-színképnek?
63. Miből adódik a fluoreszcenciás detektálás nagy érzékenysége?
64. Milyen mennyiségeket tüntetnek fel a CD és az ORD színképek tengelyein?
65. Rajzolja fel az abszorpció, a spontán emisszió és a stimulált emisszió sémáját!
66. Mit nevezünk inverz populációnak?
67. Rajzolja fel egy fluoreszkáló festékanyag Jablonski-diagramját!
68. Milyen folyamatokhoz rendelhetők a Raman-színképekben a Stokes, ill. az anti-Stokes sávok? A válaszhoz készítsen rajzot!
69. Milyen mennyiségeket tüntetnek fel a rezgési Raman-színképek tengelyein?
70. Milyen vizsgálatoknál előnyös a rezgési Raman-spektroszkópia az infravörös abszorpciós spektroszkópiához képest?
71. Folytonos, vagy impulzuslézert használunk fényforrásnak a Raman-spektrométerekben? Miért?
72. Milyen előnyei vannak a kétfoton-mikroszkópoknak a hagyományos fluoreszcencia-mikroszkópokhoz képest?
73. Hogyan változik a gerjesztett molekulák koncentrációja az időben, fényimpulzussal történő besugárzást követően?
74. Milyen mennyiségeket tüntetnek fel a villanófény-fotolízis készülékkel mért lecsengési görbe, ill. spektrum tengelyein?
75. Mi a mintára érkező két lézersugár szerepe a pumpa-próba kísérletben?
76. Mi jellemzi azokat az atommagokat, amelyekben a neutronok száma "bűvös szám"?
77. Írja fel a proton és a neutron spinjére vonatkozó képletet!
78. Milyen tagokból tevődik össze az atommagok Hamilton-operátora?
79. Milyen értékeket vehet fel az I magspin-kvantumszám, az atommag proton-, ill. neutronszámától függően?
80. Mik a feltételei annak, hogy valamely atommag Mössbauer aktív legyen?
81. Hogyan hangolják a mintára érkező sugárzás frekvenciáját a Mössbauer –spektrumok mérése során?
82. Mi a jellegzetessége a mágneses minták Mössbauer-színképének?
83. Írja fel az atommag impulzusmomentumára és mágneses momentumára vonatkozó képleteket (abszolút érték, z-irányú vetület)

84. Ábrázolja egy $I = \frac{1}{2}$ magspin-kvantumszámú atommag energiáját a mágneses indukció függvényében!
85. Mit nevezünk az NMR spektroszkópiában kémiai árnyékolásnak?
86. Milyen mennyiségeket tüntetnek fel az NMR-színképek tengelyein?
87. Milyen jelalakja van a CH_2 -csoportnak a ^{13}C spektrumban, figyelembe véve a C-H spin-spin csatolást?
88. Mit nevezünk I. rendű spektrumrészletnek?
89. Mire utal az, hogy az NMR-spektrométer 300 (500, 600, stb.) MHz-es?
90. Mi a szabad indukciós lecsengés (free induction decay, FID)?
91. Milyen oldószereket használunk az NMR spektroszkópiában?
92. Milyen okai vannak, hogy a szilárd minták NMR spektrumaiban a jelek nagyságrendekkel szélesebbek, mint az oldatspektrumokban?
93. Milyen alakú a (primitív) elemi cella? Milyen paraméterek jellemzik?
94. Milyen formában adják meg az atomi pozíciókat az elemi cellán belül?
95. A kristályszerkezet milyen jellemzőit tudjuk meghatározni röntgendiffrakciós kísérlettel, monokromatikus sugárzást használva, pormintát, ill. egykristály mintát vizsgálva?
96. Melyek a kristály-röntgendiffraktométer fő egységei?
97. Hogyan működik a röntgen-diffraktométerek sugárforrása?
98. Milyen mintatartót használnak a kristálydiffrakciós berendezésben?
99. Mit nevezünk a röntgendiffrakciós kísérletben szórási képnek (mintázatnak)?
100. Készítsen vázlatot a röntgensugár szóródásáról a kristályrácson!
101. Írja fel a Bragg-egyenletet!
102. Mik a Miller-indexek?
103. A kristálydiffrakciós kísérletben mért szórásmaximumok milyen jellemzőit használjuk fel az elemi cella paramétereinek, ill. az atomi pozícióknak a meghatározásához?
104. Mit ábrázolunk az elektronsűrűség térképen? Hogyan állapítható meg rajta az atommagok helye?