**Tantárgy adatlap**

# **BME Gyógyszervegyész-mérnök M. Sc. szak**

# **Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar Kötelező tantárgy**

## TANTÁRGY

és tantárgy követelmények

**2019. augusztus**

**Tantárgycím: Kémiai anyagszerkezettan**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Tantárgy**  **Kódja** | **Szemeszter** | **Követelmény** | **Kredit** | **Nyelv** | **Tárgyfélév** |
| BMEVEFAM204 | 7 | 3+0+0 v | 4 | magyar |  |

**Tantárgyfelelős személy és tanszék:** Kubinyi Miklós, Fizikai kémia és Anyagtudományi Tanszék

**A tantárgy előadója:**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Név | **Beosztás** | **Tanszék** |
| Kubinyi Miklós | egyetemi tanár | FKAT Tanszék |
| Kállay Mihály | egyetemi tanár | FKAT Tanszék |

**A tantárgy az alábbi témakörök ismeretére épít:** aszerves kémia és szervetlen kémia alapjai, fizika: mechanika, elektromosságtan, matematika: differenciálegyenletek.

**Kötelező/ajánlott előtanulmányi rend: -**

Tematikaütközés miatt a tantárgyat csak azok vehetik fel, akik korábban nem

hallgatták a következő tantárgyakat: -

**A tantárgy célkitűzése:** Az atomok és a molekulák szerkezetének leírása kvantummechanikai elvek alapján, továbbá az atomok, a molekulák és az összetett anyagi rendszerek szerkezetének vizsgálatára alkalmazott (elsősorban kísérleti) módszerek bemutatása

**A tantárgy részletes tematikája:**

**1. BEVEZETÉS 2 óra**

- Az atomok és molekulák szerkezetének jellemzése

- A kémiai szerkezetvizsgálati módszerek áttekintése

**2. A KVANTUMMECHANIKA ALAPELVEI 2 óra**

**3. A HIDROGÉNATOM SZERKEZETE 3 óra**

- A hidrogénatom Schrödinger-egyenlete.

- Pálya-impulzusmomentum, pálya mágneses momentum. Az elektronspin.

**4. A TÖBBELEKTRONOS ATOMOK SZERKEZETE 3 óra**

- A többelektronos atomok Schrödinger-egyenlete.

- A független részecske modell. A vektormodell.

- Az atomi színképek mérése

**5. OPTIKAI SZÍNKÉPEK 2 óra**

- A Born-Oppenheimer közelítés

- Az optikai színképek jellemzői

- Az optikai színképek értelmezése

**6. A MOLEKULÁK FORGÓMOZGÁSA 2 óra**

- A merevpörgettyû-modell. A forgó molekula kvantummechanikai elmélete

- A molekula-geometria meghatározása a forgási színképbôl

**7. A MOLEKULÁK REZGŐMOZGÁSA 3 óra**

- A harmonikus oszcillátor modell. A kétatomos molekula rezgőmozgása. A többatomos molekulák rezgésének elmélete

- Infravörös színképek

- Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópia

**8. A MOLEKULÁK ELEKTRONSZERKEZETE 4 óra**

- A molekulapálya modell. Az elektrongerjesztések elmélete.

- Abszorpciós spektroszkópia. Fluoreszcencia-spektroszkópia. Kiroptikai spektroszkópiai módszerek.

**9. LÉZEREK, LÉZERSPEKTROSZKÓPIAI MÓDSZEREK 4 óra**

- A lézerek működési elvei. Szennyezett ionkristálylézerek (Nd-YAG lézer). A lézersugár tulajdonságai

- A Raman-szórás

- A kétfoton-abszorpció

- Ultragyors spektroszkópia: gerjesztett elektronállapotok élettartamának mérése

**10. AZ ATOMMAGOK ENERIGIAÁLLAPOTAI 1 óra**

- A maghéj-modell

- A Mössbauer-effektus

**11. A MÁGNESES MAGREZONANCIA 4 óra**

- Az atommagok abszorpciója mágneses térben. A kémiai eltolódás. A spin-spin csatolás

- Oldat- és szilárdfázisú NMR spektroszkópia. Az NMR-spektrométerek működése.

**12. TÖMEGSPEKTROSZKÓPIA 2 óra**

- A tömegspektroszkópia elméleti alapjai

- Tömegspektrométerek

- A tömegspektroszkópia alkalmazásai: az elemi összetétel meghatározása, kis molekulák, polimerek, fehérjék szerkezetvizsgálata

**13. A RÖNTGENDIFFRAKCIÓ 2 óra**

- A kristályok szimmetriája

- A röntgendiffrakciós kísérlet. Az elemi cella paraméreinek meghatározása. Az atomi pozíciók meghatározása.

**A tantárgy oktatásának módja:** (előadás, számítási gyakorlat, laboratórium) előadás

#### Követelmények

1. A szorgalmi időszakban: három (nem kötelező) házi feladat a kémiai anyagszerkezettan részből. Két eredményes házi feladat kiváltja a szóbeli vizsga ’beugró’ részét
2. A vizsgaidőszakban: szóbeli vizsga a kémiai anyagszerkezettan anyagrészből, ’beugró’ kérdések + három tétel

**Konzultációs lehetőségek** A tárgy előadóival, előzetesen egyeztetett időpontban

Jegyzet, tankönyv, felhasználható irodalom: Kubinyi Miklós – Grofcsik András: Kémiai anyagszerkezettan (jegyzet a kari szerveren), továbbá az előadásokon használt számítógépes prezentációs anyag

**A tantárgy elvégzéséhez szükséges tanulmányi munka:**

Felkészülés tételjegyzék alapján. A vizsgákon ábragyűjtemény és képletgyűjtemény használata megengedett, amelyek anyagát az előadók a jegyzetből válogatták össze.

**A tantárgy tematikáját kidolgozta.**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Név | **Beosztás** | **Tanszék** |
| Kubinyi Miklós | professor emeritus | FKAT Tanszék |
| Grofcsik András | egyetemi tanár | FKAT Tanszék |
| Kállay Mihály | egyetemi tanár | FKAT Tanszék |