**KÉMIAI ANYAGSZERKEZETTAN TÉTELEK**

**2018/2019**

(sárga kiemelés: az előadási anyag alapján**)**

**I. BEVEZETÉS**

1. A Fraunhofer-kísérlet

2. Az elektromágneses sugárzás tartományai

**II. A KVANTUMMECHANIKA AXIÓMÁI**

3. A kvantummechanika mennyiségei

4. A sajátérték-egyenlet

5. Az állapotfüggvény

**III. A HIDROGÉNATOM SZERKEZETE**

6. A hidrogénatom Schrödinger-egyenlete

7. A hidrogénatom színképe

8. A hidrogénatom elektronjának pálya-impulzusmomentuma és pálya-mágnesesmomentuma

9. Az elektronspin

**IV. A TÖBBELEKTRONOS ATOMOK ELEKTRONSZERKEZETE**

10. A többelektronos atomok Schrödinger-egyenlete

11. Az atompálya modell (A független részecske modell atomokra)

12. A vektormodell

13. Az atomi színképek mérése

**V. OPTIKAI SPEKTROSZKÓPIA**

14. A Born-Oppenheimer közelítés

15. Az optikai színképek jellemzői

16. Az optikai színképek értelmezése

**VI. A MOLEKULÁK FORGÓMOZGÁSA**

17. A merevpörgettyű-modell. A kétatomos molekulák forgómozgása.

18. Többatomos molekulák forgómozgása.

19. A molekula-geometria meghatározása a forgási színképből

**VII. A MOLEKULÁK REZGŐMOZGÁSA**

20. A kétatomos molekulák rezgőmozgása

21. A többatomos molekulák rezgőmozgása

22. Infravörös színképek

23. Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópia

**VIII. MOLEKULÁK ELEKTRONSZERKEZETE**

24. A molekulapálya-modell (a független részecske modell molekulákra)

25. Az elektrongerjesztések elmélete

26. Ultraibolya-látható abszorpciós spektroszkópia

27. Fluoreszcencia-spektroszkópia

28. Optikai forgatóképesség és cirkuláris dikroizmus

**IX. LÉZEREK, LÉZERSPEKTROSZKÓPIAI MÓDSZEREK**

29. A lézerek működési elvei

30. (Választott) lézer működése (Nd-YAG, vagy nitrogén-, vagy festéklézer)

31. A lézersugár tulajdonságai

32. A Raman-szórás

33. A kétfoton-abszorpció

34. Lézeres villanófény-fotolízis

35. A pumpa-próba kísérlet

**X. AZ ATOMMAGOK ENERIGIAÁLLAPOTAI**

36. A maghéj-modell

37. A Mössbauer-effektus

**XI. A MÁGNESES MAGREZONANCIA**

38. Az atommagok abszorpciója mágneses térben

39. A kémiai eltolódás

40. A spin-spin csatolás

41. Oldat- és szilárdfázisú NMR spektroszkópia

42. Az NMR-spektrométerek működése.

**XII. TÖMEGSPEKTROMETRIA**

43. A tömegspektrométerek fő részei. Az egyszeres fókuszálású tömegspektrométer működése.

44. Ionizációs módszerek

45. Tömeg-analizátorok

46. Az elemi összetétel meghatározása tömegspektrometriával (HRMS)

47. Kis molekulák, polimerek, fehérjék szerkezetvizsgálata tömegspektroszkópiával

**XIII. A RÖNTGENDIFFRAKCIÓ**

48. Az ideális kristály

49. A röntgendiffrakciós kísérlet

50. Az elemi cella paramétereinek meghatározása

51. Az atomi pozíciók meghatározása