

SPEKTROSKÓPIA II.

Tételsor 2005/06 I. félév

1. Az atomi sugárzás klasszikus tárgyalása (dipólusugárzás és a Lorentz-féle atommodel).
2. Az emisszió és az abszorpció kvantumos leírása (az Einstein-féle koeficiensek, oszcillátorerősség és diszperziós formula).
3. A B átmeneti valószínűségek meghatározása. Vonalerősség.
4. A spektrumvonalak alakja (a vonalak függvény, természetes vonalszélesség és vonalkiszélesedési mechanizmusok ütközési, telítődési, modulációs, Doppler és izotóp).
5. A H atom és a H-szerű ionok spektruma (nemrelativisztikus kvantummechanikai megoldása, energiaszintek és ionizációs energia, atompályák és osztályozásuk, pályasugarak)
6. A H atom és a H-szerű ionok finomszerkezete (Íránykvantálás és a spin: a Stern-Gerlach és az Einstein- de Haas kísérlet. A hidrogén és H-szerű ionok kiválasztási szabályai és az átmeneti valószínűségek, az atomi számtól való függés. A Lamb-eltolódás és hiperfinom felhasadás).
7. Többelelektronos atomok szerkezete. Pauli-elv. Áthatolás és árnyékolás. Felépítési elv. Az ionizációs energia periódusossága. Önkonzisztens pályák. Többelelektronos atomok spektruma.
8. Szingulett-triplett állapotok. Spin-pálya kölcsönhatás. Russel-Sanders csatolás. Termek jelölése. Ekvivalens elektronok. Hund-szabály. Alkálifémek spektruma.
9. Atomok külső térben: a normális és anomális Zeeman effektus, Stark-effektus.
10. Forgó molekulák és energia szintjei. Degenerációk és felhasításuk. Centrifugális torzulás.
11. Rotációs mikrohullámú spektrumok: kiválasztási szabályok és a vonalak intenzitása. Rotációs Raman spektrumok kialakulása. Kéttomos és lineáris többatomos molekulák rotációs Raman spektruma.
12. Kéttomos molekulák vibrációs IR spektruma. Disszociációs energia meghatározása (Birge-Sponer módszer). Kéttomos molekulák vibrációs Raman spektruma.
13. Kéttomos molekulák vibrációs-rotációs spektruma. Többatomos molekulák vibrációs spektruma: normál módusok, lokalizált (csoport) mozgások.