

Modern szerkezetvizsgálati módszerek
(kv2n1i03)
Kollokviumi tételsor
2010/2011

IR tételek

1. Az infravörös és a Raman spektroszkópia elméleti alapjai
2. Az infravörös spektrométerek alapelemei (forrás, ablakok, detektor, diszperziós elem/interferométer)
3. Az FT-IR készülékek működési elve
4. Mintaelőkészítés és mérési módszerek az infravörös spektroszkópiában
5. Karakterisztikus frekvenciák és szerkezeti információk az IR és Raman spektrumokban

UPS tételek

1. A fotoionizáció alapjelensége és energetikája, alapvető fogalmak (hatáskeresztmetszet, adiabatikus és vertikális IE) és a *Franck-Condon*-elv. Az UPS kialakulásának története, helye és szerepe a molekuláspektroszkópián belül.
2. A kísérleti berendezés: vákuumrendszer, sugárforrás, mintabeeresztés, ionizációs kamra, analizátor és detektor.
3. A fotoelektron spektrum és a spektrum alakját meghatározó tényezők: rezgési finomszerkezet, spin-pálya csatolás, *Jahn-Teller*-effektus, disszociáció, autoionizáció, széles/átfedő spektrumsávok.
4. A spektrumok értelmezése: a *Koopmans*-f. elv; a spektrumok értelmezését elősegítő fizikai és kémiai módszerek.
5. Az UPS alkalmazásai: fizikai-szerves kémia, molekulák térszerkezete, gyökök és tranziensek vizsgálata, energetika, adszorbeált rétegek tanulmányozása (heterogén katalízis).

Röntgen-diffrakció tételek

1. A krisztallográfia alapfogalmai: elemi cella, kristályrács, kristályszimmetriák, Bragg-egyenlet, Laue indexek, reciprokrács, Ewald gömb.
2. A röntgendiffrakciós adatgyűjtés: a készülék felépítése, az adatgyűjtés lépései. A felbontás fogalma.
3. Fázisprobléma megoldó módszerek összehasonlítása: direkt módszerek, molekuláris helyettesítés, izomorf helyettesítés, "Charge-flipping" algoritmus.
4. Modellépítés és szerkezetfinomítás a kismolekulás krisztallográfiában.
5. Kismolekulás krisztallográfiai alkalmazások: abszolút konfoguráció, polimorfia. Pordiffrakciós vizsgálatok és alkalmazásaik.
6. Makromolekulás krisztallográfia alkalmazásai a szerkezeti genomikában, gyógyszerkutatásban és időfüggő folyamatok vizsgálatában. A riboszóma szerkezetvizsgálata.

NMR tételek

1. Magspinek viselkedése homogén mágneses térben.
2. A pulzus-NMR elvének bemutatása a vektormodell alapján.
3. Az NMR spektrométer főbb részei és ezek funkciói.

4. NMR spektroszkópiai szerkezeti paraméterek (kémiai eltolódás, skaláris csatolási állandó, relaxációs idők)
5. Egy- és kétdimenziós NMR kísérletek (C13CPD, INEPT, DEPT135, COSY, HSQC, adatfeldolgozás, kémiai információtartalmuk)

MS tételek

I. A berendezés

- A tömegspektrométer és felépítése. Vákuumrendszer, vákuumtartományok, főbb jellemzők
- Ionforrás-típusok (MALDI, EI, FAB, CI, SIMS, ESI, APCI)
 - o ionizáció mechanizmusa, molekulaion/"kvázimolekulaion", energiaátadás mértéke
 - o gyökion/zárthéjú ion, mintabejuttatás.
 - o milyen a spektrum? (Fragmentáció mértéke)
 - o Milyen kromatográfias módszerhez kapcsolhatók? Milyen típusú mintához ajánlhatók?
 - o Melyek a légy ionizációs módszerek? Hogyan lehet ezeknél fragmentációt kiváltani?
- Analizátorok (Mi az analizátorok funkciója?, Hogyan működnek?)
- Adatfeldolgozó egység (Mi a centroid adatgyűjtés lényege?, Mi a következménye annak, ha a detektálási küszöböt túl alacsonyra, ill. túl magasra állítjuk?)

II. A tömegspektrum

- Hogy néz ki egy tömegspektrum (tengelyek, egységek)
- Fogalmak: Alapcsúcs (báziscsúcs), molekulacsúcs, izotópcsőcs, névleges tömeg, monoizotópos tömeg, átlagos (kémiai) tömeg. Összionáram-görbe, ionkromatogram, és miben nyújtanak segítséget? Izotópkötegek, alapizotóp. Mi a tömegspektrometriai molekulatömeg?
- Vajon hogy néz ki a metilklorid, ill. a benzil-klorid molekulacsúcsának izotópkötege?
- Nitrogénszabály, gyökionszabály.
- Hogyan néz ki egy általános, nitrogént nem tartalmazó vegyület tömegspektruma?
- Milyen ionokkal kell foglalkoznunk egy elektronütközéses tömegspektrum megfejtése közben, milyenekkel nem?
- Magyarázza meg a toluol, etil-benzol, metanol tömegspektrumát!

Atomi erő mikroszkópia

1. A pásztázó tűszondás módszerek és jellemzésük
 - Az atomi erő mikroszkópia és a pásztázó alagút áram mikroszkópia összehasonlítása
 - A műszer felépítése, főbb részei és az érzékelés megoldásai, érzékenység
2. Az atomi erő mikroszkópia
 - Mérési módok, nyerhető információ (állandó erő, állandó távolság, laterális erő, kontakt mód, letapogató mód)
 - Példák a vizsgálható anyagi rendszerekre
3. Az atomi erő mikroszkópia speciális alkalmazásai
 - Nanomintázat előállítás (tiol tinta, maratás)
 - Erő spektroszkópia