

### Teszt kérdések. A cianid (CN) optikai spektrumának tanulmányozása

1. A kétatomos molekula összenergiája, milyen energiák összegeként adható meg? Magyarázd, és értelmezd ezeket, mekkora az egymáshoz képesti relatív nagyságuk?
2. Rajzoljuk le két elektron energiaszínhez tartozó vibrációs energiaszinteket, és rajz alapján, magyarázzuk meg, hogyan történik a fotonelnyelése (abszorpció) és fotonkibocsátása (emisszió)? Hogyan számoljuk ezen fotonok frekvenciáját, energiáját, hullámhosszát, és a fényhullámhoz tartozó hullámszámot?
3. Rezgési és forgási átmenetknél, hogyan változhatnak a rezgési ( $v$ ) és forgási ( $J$ ) kvantumszám értékei?
4. Írjuk fel a rezgési (G) és forgási (F) spektrális tényezők (term-ek) alakját roto-vibrációs modell alapján, és értelmezzük a kifejezésben szereplő mennyiségeket!
5. Az elektron-átmenetek vibrációs szerkezete. Hogyan számolható ki két energiaszint között történő átmenet során keletkezett foton hullámszámát? Képlet, tagok értelmezése!
6. Mit értünk nullponti energia alatt? Mennyi az értéke?
7. Rajzold le és értelmezd egy kétatomos molekula potenciális energia görbáját! (PEC: Potential Energy Curve ... több paraméter esetén PES: Potential Energy Surface)
8. A laborgyakorlat leírását figyelembevéve, hogyan számoljuk ki két elektron energiaszínhez tartozó vibrációs átmenetekhez tartozó hullámszámot ( $\tilde{\nu}_{v'v''}$ )? Értelmezd a benne szereplő mennyiségeket!
9. Rajzold le a  $\Delta v = -1; 0; +1$  átmeneteket!
10. Ismerve egy kétatomos molekula rezgési alapl módusát, hogyan számolható ki a két atom közötti kötési erőállandó értéke ( $K$ )?
11. Mit értünk egy molekula diszociációs energiája alatt?
12. Ismerve egy kétatomos molekula rezgési alapl módusát, hogyan számolható ki a molekula diszociációs energiája ( $W_D$ )?
13.  $1\text{cm}^{-1}$  körülbelül hány  $eV$ ? Egy elektronvolt hány Joule?
14. A Morse-potenciál matematikai alakja! Értelmezd! Az alábbi ábra értelmezése!

