

Elméleti alapismeretek az atom-, és molekula spektroszkópai gyakorlatokhoz

A gyakorlat célkitűzései:

- Alapvető atom- és molekula spektroszkópai elméleti és gyakorlati ismeretek megszerzése.
- Számítógép vezérelt atom- és molekula spektrométereken (mérőberendezéseken) egyszerűbb atom- és molekula fizikai jelenségek tanulmányozása.
- Lézerspektroszkópai mérések.

A gyakorlatokhoz szükséges atomfizikai elméleti és műszeres spektroszkópai alapismeretek

1. Vonalas színeképek, sávós színeképek. PLANC-féle sugárzási törvény (1900), BOHR modell (1916), SCHRÖDINGER modell (1926). Termrendszerek, GROTRIAN-diagramm. (Laborlátogatás szintjén) *Fényforrások* (W lámpa, Hg lámpa, Na,). Folytonosak, impulzusüzeműek. Spektrumtáblázatok.

2. Egyszerűbb atomos és molekuláris rendszerek fényelnyelésének és fénykibocsátásának rövid kvantumelméleti és fenomenológiai leírása. Átmeneti valószínűség. Gerjesztett állapot élettartam. Gerjesztés elektronütközés és fotonelnyelés útján. *Színeképi bontó elemek* (színszűrők üvegszűrők, interferenciás szűrők, monokromátorok).

3. Abszorpció mérés elmélete (sávok kapcsolata atom és molekula fizikai paraméterekkel) és gyakorlata (transzmisszió, extinkció, Beer-Lambert törvény; üreghatódú lámpák, lézerek, mint gerjesztő, átvilágító fényforrások). *Fényérzékelő detektorok* (fotocella, fotoelektron sokszorozó, fotodióda, mikroszatorna lemez, tápegységek).

4. Atomabszorpció mérés módszerei. (minta előkészítés, láng, grafitkályha, lézerek, mint atomizáló eszközök).

5. Oldatok fotolumineszcencia jelenségének elméleti tárgyalása. Teljes lumineszcencia színekép, (időintegrált) gerjesztési-, emissziós, szinkrongerjesztési színeképek. Lecsengési görbék. Polarizáció, anizotrópia. *Oldatok abszorpciójának mérése* (UV, VIS) hagyományos abszorpciós spektrofotométerrel. Számítógép vezérelt abszorpciómérő.

6. Fotolumineszcencia, fotolumineszcencia mérő berendezések. Mért színeképek, technikai színeképek, valódi színeképek. A mért színeképek kiértékelése (korrekció spektrális átviteli függvényre, reabszorpció korrekció). Kis és nagy koncentrációjú oldatok fotolumineszcencia színeképének kimérése. Különböző geometriájú (minta)mérőterek megismerése, mintatartók kiválasztása, beállítása (előtte abszorpciómérés).

7. Steady-State emissziós-, gerjesztési- és szinkrongerjesztési színeképek mérése számítógép vezérelt fotoluminométerrel. Spektroluminométer analitikai alkalmazási lehetőségei.

8. Előadás: Impulzus gerjesztésű fotolumineszcencia. A gerjesztést követő rekombinációs, dezaktivációs folyamatok időbeliségéről. (Kölcsönhatás mentes keveredése abszorbeáló, valamint lumineszkáló és nem lumineszkáló komponenseknek. Dimerizáció, komplexképződés, detergens hatás, ciklodextrin hatás. Excimer- exciplex képződés. Molekulák közötti energia átadás. Molekulán belüli energia átadás, rezgési- rotációs relaxáció, anizotrópia mérés).

Gyakorlat: Fizikai Kémia Tanszék fázisfluoriméterének bemutatása.

10. Előadás: Alapvető ismeretek a (különböző módon indukált) plazma emissziós atomspektroszkópiáról (grafitkályha, ívgerjesztés, nagyfeszültségű szikra gerjesztés, induktív csatolású plazma, lézerrel indukált plazma). (stacionárius plazmák, dinamikus plazmák). Az elemek színeképeinek (időbontatlan) detektálása, annak finommechanikai, elektronikai körülményei (az elemek színeképeinek strukturáltságáról, monokromátor felbontóképessége, szekvenciális mérés, sokcsatornás detektálás. Színeképvonalak leírása Gauss-féle, szimmetrikus Lorentz és aszimmetrikus Lorentz görbékkel. Analitikai alkalmazási lehetőségek. Prospektusok tanulmányozása modern eszközökről.

Gyakorlat: (Labormérés) Lángemisszió mérések egyszerű fémanalitikai spektroszkóppal. (Minőségi azonosítás: Cu, Fe, Mg, Ca, Na,). (Laborlátogatás:)

11. Előadás: Alapvető ismeretek a lézer impulzust követő plazma emisszióról. A gerjesztést követő rekombinációs, dezaktivációs folyamatok időbeliségéről.

Gyakorlat: Számítógép vezérelt lézer-indukált sokcsatornás atomemissziós spektrométer szolgáltatásainak tanulmányozása, analitikai alkalmazási lehetőségek. (Minőségi azonosítás: Cu, Fe, Mg, Ca, Na,). Színképvonalak leírása Gauss-féle, szimmetrikus Lorentz és aszimmetrikus Lorentz görbékkel.

12. Előadás: Egyéb spektroszkópai módszerek: Tömegspektrometria (tömegspektrométerek felépítése, alkalmazási területük). Fourier transzformációs spektrometria (FTS), FTIR spektroszkópia. Raman spektroszkópia. Turbidimetria. Lézeres spektroszkópai módszerek.

Gyakorlat: (Laborlátogatás) Anyag szétválasztási technikák: Az oldószer extrakciónak és a kromatográfiának az alapjai. Vékonyréteg kromatográfia. Nagy érzékenységű folyadékkromatográfia. Gáz kromatográfia.

13. Előadás: Magfizikai, atomfizikai mérési módszerek: Gamma-spektrometria. Alfa-spektrometria. Dozimetria. Röntgenspektrometria.

Gyakorlat: Lézeres spektroszkópai módszerek. Látogatás a Környezetvédelmi Felügyelőségen.

Irodalom

- [1] Farkas József, Kaposi Olivér (ed.), Mihályi László, Mika József, Riedel Miklós: Bevezetés fizikai kémiai mérésekbe I-II., I. Mérései adatok feldolgozása 19-106., II.6. Anyagszerkezet: 6.3. Optikai mérések 323-410., Tankönyvkiadó, Budapest 1988.
- [2] Incédi János: Folyamatos és automatikus analízis, II. Méréseredmények statisztikus értékelése 36-88., III. Folyamatok matematikai elemzése 89-140., Muszaki Könyvkiadó, Budapest 1984.
- [2] K. Doerner, R. Geyer: Analytikum, 8. unveränderte Auflage, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, 1. Grundlagen analytischer Verfahrensweisen 15-31, 4. Angewandte Spektroskopie, 198-285-348., Leipzig, 1990.
- [3] C. David West: Essentials of Quantitative Analysis, Ch. 11. Atomic Spectroscopy, 256-291, Ch. 12. molecular Spectrophotometry in the Ultraviolet-Visible Region, 292-321. Mc Graw-Hill Book Company, New York, 1987.
- [5] G.W. Ewing: Instrumental Methods of Chemical Analysis, Ch.2. Introduction to Optical Methods 7-31, Ch.3. The Absorption of Radiation: Ultraviolet and Visible 32-77, Ch.4. The Absorption of Radiation: Infrared 78-108, Ch.5. Atomic Absorption, 109-123, Ch.6. Molecular Luminescence: Fluorimetry, Phosphorimetry, and Raman Spectroscopy, 124-146, Ch.8. The Scattering of Radiation, Ch.9. Atomic Emission Spectroscopy, Fifth Edition, McGraw-Hill Book Company, New York, 1985.

Kérdések a Spektroszkópia gyakorlatokhoz:

1. Írja fel a BALMER-formulát!
2. Írja fel a WIEN-féle eltolódási törvényt!
3. Írja fel a PLANC-féle sugárzási törvényt!
4. Mit értünk átmeneti valószínűség fogalmán?
5. Mit értünk gerjesztett állapot élettartamán?
6. Mondjon gyakorlati példákat ahol a gerjesztés elektronütközés és fotonelnyelés útján történik!
7. Mi a kapcsolat a következő mennyiségek között és milyen egységeiket ismeri: hullámhossz, hullámszám, frekvencia?
8. Adja meg a váltószámokat a következő energia egységek között: eV, aJ, cm^{-1} !
9. Mi az a termrendszer, vagy GROTRIAN-diagramm?
10. Jellemezze röviden a következő fényforrásokat spektrálisan (W lámpa, Hg lámpa, Cd, Ne, Ar, Na,)!
11. Jellemezze röviden a következő fényforrásokat felépítésük alapján (W lámpa, Hg lámpa, Cd, Ne, Ar, Na lámpák, üreges katódú lámpák)!
12. Nevezzen meg folytonos és impulzusüzemű lézereket!
13. Milyen fényforrások spektrumvonalait rendszerezik táblázatokba?
14. Jellemezze röviden a következő színképi bontó elemeket (üvegszűrők, interferenciás szűrők)!
15. Mi a különbség gyakorlati szempontból a prizmás és az optikai rácsos színbontás között?
16. Milyen főbb monokromátor felépítéseket ismer?
17. *Mi az előnye az un. "szinuszmeghajtónak"?*
18. Adja meg a feltételét és fogalmazza meg a Beer-Lambert törvényt!
19. Mit jelentenek az abszorpció (és transzmisszió) mérés során használt fogalmak, mi a jelük (extinkció, moláris dekadikus extinkció koefficiens, abszorpciós hatáskeresztmetszet, transzmisszió)?
20. Milyen főbb spektrális tartományait különbözteti meg az abszorpció mérésnek úgy atomfizikai és molekulafizikai szempontból, mint készülék oldalról?
21. Milyen fényérzékelő detektorokat különböztet meg?
22. Adja meg röviden a következő fényérzékelő detektorok felépítését, működési elvét (fotocella, fotoelektron sokszorozó).
23. Adja meg röviden a következő fényérzékelő detektorok felépítését, működési elvét (fotodióda, diódasor, mikrocsatorna lemez).
24. *Ismertesse röviden az elektromos jelfeldolgozás eseteit, egy-egy ilyen elrendezés főbb részeit (analóg jelfeldolgozás, digitális jelfeldolgozás, egyfotonszámlálás)!*
25. *Ismertesse röviden, blokksémászerűen az atomabszorpció mérő felépítését!*
26. *Ismertesse röviden a következő plazmaképzési formák előnyeit, hátrányait: láng, grafitkályha, ívkisülés, nagyfeszültségű szikra, induktív csatolású plazma!*
27. Adja meg a legintenzívebb átmenetek hullámhosszát a következő elemek neutrális és egyszerűen gerjesztett atomi formáinál: Cu, Zn, Mg, Al, Pb, Hg, Si, Cr, Ag, stb.
28. *Ismertesse röviden, blokksémászerűen az oldatok abszorpció mérő berendezésének felépítését!*
29. Sorolja fel az oldat abszorpció mérésénél egy adott mérési pontban milyen beállítási lépéseket kellene hagyományos eszköznél elvégezni!
30. Adja meg a fotolumineszcencia definícióját!
31. Adja meg a fluoreszcencia kvantummechanikai definícióját!
32. Adja meg a foszforeszcencia kvantummechanikai definícióját!
33. Adja meg a Jablonski-féle termsémát!
34. Mit mond ki a Kasha-féle szabály?

35. Mit fogalmaz meg az oldatok abszorpciós és fluoreszcencia színeképeire vonatkozó tükrörszimmetria szabály?
36. Osztályozza a különböző rendeltetésű fotolumineszcencia mérő berendezéseket!
37. Ismertesse, hogyan történik egy monokromátor hullámhossz szerinti hitelesítése (spektrállámpa)!
38. Ismertesse, hogyan történik egy monokromátor és a hozzá csatlakozó fotodetektor együttes spektrális érzékenység szerinti hitelesítése (wolframlámpa)!
39. Ismertesse, hogy milyen különböző geometriájú (minta)mérőtereket, mintatartókat ismer fotolumineszcencia méréshez, melyiket milyen esetben használja?
40. Ismertesse, hogyan történik kis és nagy koncentrációjú oldat esetében a fotolumineszcencia színekép kimérése!
41. Mit jelent a mért színekép, a technikai színekép, a valódi színekép?
42. Hogyan történik a mért színeképek kiértékelése (korrekció spektrális átviteli függvényre)?
43. Hogyan kell kimérni egy oldat esetében a fotolumineszcencia, a gerjesztési és a szinkrongerjesztési színeképeket?
44. Adjon rövid áttekintés molekuláris jelenségekről, amelyek oldatok abszorpció mérésével és (időintegrált) fotolumineszcencia spektroszkópiával nyomon követhetők!
45. Jellemezze az abszorpciós és a fotolumineszcencia színeképeket, ha a komponensek koncentrációját figyelembe kell venni (reabszorpció korrekció)!
46. Jellemezze az abszorpciós és a fotolumineszcencia színeképeket abszorbeáló, valamint lumineszkáló és nem lumineszkáló komponensekből álló oldatok esetében (anyagok kölcsönhatás mentes keveredése)!
47. Foglalja össze röviden, mit jelent a színeképekre nézve a dimerizáció, a komplexképződés, a detergens hatás, a ciklodextrin hatás!
48. Foglalja össze röviden, mit jelent a színeképekre nézve az excimer- és az exciplex képződés, a molekulák közötti energia átadás, a molekulán belüli energia átadás, a rezgési- rotációs relaxáció, az anizotropia, stb.)!
49. Ismertesse, milyen különböző felépítésű impulzus gerjesztésű fotolumineszcencia mérő berendezést ismer!
50. Hogyan mérne foszforeszcencia lecsengési görbét?
51. Hogyan értékelné ki lecsengési görbét lineáris plot módszerrel, dekonvolúcióval?
52. Mit jelen a lecsengési görbe kiértékelésénél az egy- és a két exponenciális összegével történő közelítés?
53. különböző módon indukált) plazma emissziós atomspektroszkópiáról (grafitkályha, ívgerjesztés, nagyfeszültségű szikra gerjesztés, induktív csatolású plazma, lézerrel indukált plazma). (stacionárius plazmák, dinamikus plazmák).

Spektroszkópia gyakorlatok záróvizsga kérdései

1. Ismertesse röviden az atomi folyamatot, ami fényemisszióhoz vezet!
2. Mondjon gyakorlati példákat, ahol a gerjesztés elektronütközés és fotonelnyelés útján történik!
3. Mi a kapcsolat a következő mennyiségek között és milyen egységeket ismeri: hullámhossz, hullámszám, frekvencia?
4. Adja meg a váltószámokat a következő energia egységek között: eV, aJ, cm^{-1} !
5. Mi az a termrendszer, vagy GROTRIAN-diagramm?
6. Jellemezze röviden a következő fényforrásokat spektrálisan W, Hg, Na lámpa!
7. Jellemezze a következő fényforrásokat felépítésük alapján: W, Hg, Na lámpa!
8. Nevezzen meg folytonos és impulzusüzemű lézereket!
9. Jellemezze röviden a következő színeképi bontó elemeket (üvegszűrők, interferenciás szűrők)!
10. Mi a különbség gyakorlati szempontból a prizmás és az optikai rácsos színbontás között?
11. Adja meg a feltételét és fogalmazza meg a Beer-Lambert törvényt!
12. Mit jelentenek az abszorpció (és transzmisszió) mérés során használt fogalmak, mi a jelük (extinkció, moláris dekadikus extinkció koefficiens, abszorpciós hatáskeresztmetszet, transzmisszió)?
13. Ismertesse röviden, blokkémaszerűen az oldatok abszorpció mérő berendezésének felépítését!
14. Jellemezze röviden a következő fényérzékelő detektorokat: fotocella, fotoelektron sokszorozó, fotodióda, diodasor, mikrocsatorna lemez!
15. Ismertesse röviden a következő plazmaképzési formák előnyeit, hátrányait: láng, grafitkályha, ívkisülés, nagyfeszültségű szikra, induktív csatolású plazma!
16. Adja meg a legintenzívebb átmenetek hullámhosszát a következő elemek neutrális és egyszerűen gerjesztett atomi formáinál: Cu, Zn, Mg, Al, Pb, Hg, Si, Cr, Ag, stb.
17. Adja meg a fotolumineszcencia definícióját!
18. Adja meg a Jablonski-féle termsémát, a fluoreszcencia és az foszforeszcencia definícióját!
19. Osztályozza a különböző rendeltetésű fotolumineszcencia mérő berendezéseket!
20. Hogyan kell kimérni egy oldat esetében a fotolumineszcencia, a gerjesztési és a szinkrongerjesztési színeképeket?
21. Ismertesse, milyen különböző felépítésű impulzus gerjesztésű fotolumineszcencia mérő berendezést ismer!
22. Hogyan mérne foszforeszcencia lecsengési görbét?

1. Írja fel a BALMER-formulát!
2. Ismertesse röviden az atomi folyamatot, ami fényemisszióhoz vezet!
3. Adja meg a váltószámokat a következő energia egységek között: eV, aJ,
4. Mondjon gyakorlati példákat, ahol a gerjesztés elektronütközés és fotonelnyelés útján történik!
5. Jellemezze röviden a következő fényforrásokat spektrálisan W, Hg, Na lámpa!
6. Mi a különbség gyakorlati szempontból a prizmás és az optikai rácsos színbontás között?
7. Adja meg a feltételét és fogalmazza meg a Beer-Lambert törvényt!
8. Adja meg a fluoreszcencia és a foszforeszcencia kvantummechanikai definícióját
9. Ismertesse röviden a következő plazmaképzési formák előnyeit, hátrányait: láng, grafitkályha, ívkisülés, nagyfeszültségű szikra, induktív csatolású plazma!
10. Ismertesse, milyen különböző felépítésű impulzusgerjesztésű fotolumineszcencia mérő berendezést ismer! Hogyan mérne foszforeszcencia lecsengési görbét?

Spektroszkópia gyakorlatok záróvizsga kérdései (példa egy vizsgalagra)

Alapkérdések:

1. Mondjon gyakorlati példákat ahol a gerjesztés elektronütközés és fotonelnyelés útján történik! (2 pont)
2. Mi a kapcsolat a következő mennyiségek között és milyen egységeket ismeri: hullámhossz, hullámszám, frekvencia? (2 pont)
3. Adja meg a váltószámokat a következő energia egységek között: eV, aJ, cm^{-1} ! (2 pont)
4. Mi az a termrendszer, vagy GROTRIAN-diagramm? (2 pont)
5. Jellemezze a következő fényforrásokat felépítésük alapján: W, Hg, Na lámpa! (2 pont)
6. Nevezzen meg folytonos és impulzusüzemű lézereket! (2 pont)

Kísérleti I. kérdések

7. Mit jelentenek az abszorpció (és transzmisszió) mérés során használt fogalmak, mi a jelük (extinkció, moláris dekadikus extinkció koefficiens, abszorpciós hatáskeresztmetszet, transzmisszió)? (3 pont)
8. Ismertesse röviden, blokkémaszerűen az oldatok abszorpció mérő berendezésének a felépítését! (3 pont)
9. Ismertesse röviden a következő plazmaképzési formák előnyeit, hátrányait: láng, grafitkályha, ívkisülés, nagyfeszültségű szikra, induktív csatolású plazma! (3 pont)
10. Adja meg a legintenzívebb átmenetek hullámhosszát a következő elemek neutrális és egyszerűen gerjesztett atomi formáinál: Cu, Zn, Al, Pb, Hg! (3 pont)

Kísérleti II. kérdések

11. Adja meg a fotolumineszcencia fenomenológiai definícióját! (2 pont)
12. Adja meg a fluoreszcencia és a foszforeszcencia kvantummechanikai definícióját! (3 pont)
13. Adja meg a Jablonski-féle termsémát! (2 pont)
14. Ismertesse, hogyan történik kis és nagy koncentrációjú oldat esetében a fotolumineszcencia színekép kimérése! (2 pont)
15. Mit jelent fotolumineszcencia a mért színekép, a technikai színekép, a valódi színekép? (3 pont)

Kiértékelési kérdések:

16. Hogyan történik a mért színeképek kiértékelése? (3 pont)
17. Hogyan kell kimérni egy oldat esetében a fotolumineszcencia, a gerjesztési és a szinkrongerjesztési színeképeket? (3 pont)
18. Hogyan mérne foszforeszcencia lecsengési görbét és hogyan értékelné ki lineáris plot módszerrel? (3 pont)

Max: 45 pont;

24 ponttól 2-es

30 ponttól 3-as

35 ponttól 4-es

40 ponttól 5-ös