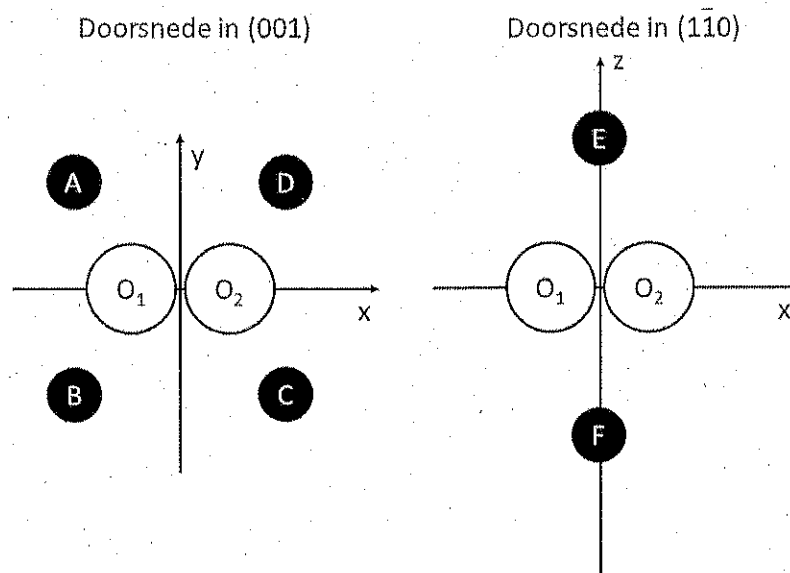


Wanneer alkalihalogenide kristallen aan lucht worden gesynthetiseerd, worden er zuurstofmoleculen (O_2) ingebouwd op anionplaatsen. Een fragment van een dergelijk defect in KCl is weergegeven in de figuur op de volgende bladzijde. De O-O as ligt volgens een $\langle 110 \rangle$ kristalas, die in de figuur gelabeld is als de x-as van het defect. De z-as wordt volgens een de $\langle 001 \rangle$ richting gelegd. In de figuur worden twee vlakke doorsneden getoond, in het (001) vlak en in het $(1\bar{1}0)$ vlak. Voor de moleculaire elektronische structuur van dit defect zijn volgende valentie-elektronenorbitalen van belang: de 2s en 2p orbitalen op de twee zuurstofatomen (O_1 en O_2) en de 4s orbitalen op de 6 dichtste nabur K^+ ionen rond de zuurstofmolecule, die A t.e.m. F gelabeld zijn. De symmetriegroep van dit defect is D_{2h} en de transformatie van de orbitalen van belang onder de operaties van deze groep staan in de tabel op de volgende bladzijde samengevat.

Gevraagd:

- 1) Bepaal de karakters van de voorstelling van D_{2h} die wordt gegenereerd door de opgegeven atomaire orbitalen en reduceer die in irreps van D_{2h} . (/1)
- 2) Bepaal alle symmetrie-aangepaste lineaire combinaties van de opgegeven atomaire orbitalen die volledig symmetrisch zijn, dit wil zeggen, A_g symmetrie vertonen. (/1.5)
- 3) Bepaal alle symmetrie-aangepaste lineaire combinaties van de gegeven atomaire orbitalen die met geen enkele andere symmetrie-aangepaste lineaire combinatie van de gegeven atomaire orbitalen overlap vertoont. (/1.5)
- 4) Door overgang van de basis van de gegeven atomaire orbitalen naar de basis van symmetrie-aangepaste lineaire combinaties van atomaire orbitalen wordt de Hamiltoniaan van de dit moleculaire defect gedeeltelijk gediagonaliseerd. Representeer deze Hamiltoniaan schematisch in deze symmetrie-aangepaste basis. Tip: om deze vraag op te lossen hoeft u deze symmetrie-aangepaste basis niet volledig te bepalen. (/1)

Figuur



Tabel

	E	C_{xx}	C'_{xy}	C''_{xx}	i	σ_{yx}	σ'_{xx}	σ''_{xy}
Δ_{O_1}	Δ_{O_1}	Δ_{O_1}	Δ_{O_2}	Δ_{O_2}	Δ_{O_2}	Δ_{O_2}	Δ_{O_1}	Δ_{O_1}
p_{xO_1}	p_{xO_1}	p_{xO_1}	$-p_{xO_2}$	$-p_{xO_2}$	$-p_{xO_2}$	$-p_{xO_2}$	p_{xO_1}	p_{xO_1}
p_{yO_1}	p_{yO_1}	$-p_{yO_2}$	p_{yO_2}	$-p_{yO_2}$	$-p_{yO_2}$	p_{yO_2}	$-p_{yO_1}$	p_{yO_1}
p_{zO_1}	p_{zO_1}	$-p_{zO_2}$	$-p_{zO_2}$	p_{zO_2}	$-p_{zO_2}$	p_{zO_2}	p_{zO_1}	$-p_{zO_1}$
Δ_{O_2}	Δ_{O_2}	Δ_{O_2}	Δ_{O_1}	Δ_{O_1}	Δ_{O_1}	Δ_{O_1}	Δ_{O_2}	Δ_{O_2}
p_{xO_2}	p_{xO_2}	p_{xO_2}	$-p_{xO_1}$	$-p_{xO_1}$	$-p_{xO_1}$	$-p_{xO_1}$	p_{xO_2}	p_{xO_2}
p_{yO_2}	p_{yO_2}	$-p_{yO_1}$	p_{yO_1}	$-p_{yO_1}$	$-p_{yO_1}$	p_{yO_1}	$-p_{yO_2}$	p_{yO_2}
p_{zO_2}	p_{zO_2}	$-p_{zO_1}$	$-p_{zO_1}$	p_{zO_1}	$-p_{zO_1}$	p_{zO_1}	p_{zO_2}	$-p_{zO_2}$
Δ_A	Δ_A	Δ_B	Δ_D	Δ_C	Δ_C	Δ_D	Δ_B	Δ_A
Δ_B	Δ_B	Δ_A	Δ_C	Δ_D	Δ_D	Δ_C	Δ_A	Δ_B
Δ_C	Δ_C	Δ_D	Δ_B	Δ_A	Δ_A	Δ_B	Δ_D	Δ_C
Δ_D	Δ_D	Δ_C	Δ_A	Δ_B	Δ_B	Δ_A	Δ_C	Δ_D
Δ_E	Δ_E	Δ_F	Δ_F	Δ_E	Δ_F	Δ_E	Δ_E	Δ_F
Δ_F	Δ_F	Δ_E	Δ_E	Δ_F	Δ_E	Δ_F	Δ_F	Δ_E