

Examen Inleiding tot de atoom- en molecuulfysica

Derde Bachelor Fysica en Sterrenkunde

13 januari 2020

Theorie

Vraag groep Henk Vrielinck

Bespreek de Born-Oppenheimer benadering voor het berekenen van moleculaire energieniveaus. Pas deze benadering toe op het probleem van een diatomair H_2^+ moleculair ion en vind de Hamiltoniaan voor de elektronische energie van dit moleculair ion. Bespreek de oplossingen van deze Hamiltoniaan aan de hand van Figuur 7.3, alsook de LCAO benadering van dit probleem.

Vraag groep Philippe Smet

Bespreek het energieniveauschema voor een p^2 configuratie in het geval van jj koppeling. Bespreek de invloed van de Coulombinteractie en de spinbaankoppeling, en evalueer de gebruikte benaderingen. Bespreek het optreden van directe en uitwisselingsintegralen, en het gebruik van Slaterdeterminanten.

Oefeningen

Oefening 1

Het element Sc II bevindt zich in de geëxciteerde toestand $[Ar]3d^1 4d^1$.

- In hoeveel microtoestanden kan het systeem zich bevinden?
- Geef de mogelijke termen en multipletten die gevormd kunnen worden.
- Schets een energieniveauschema van de toestanden na de energiecorrectie voor de Coulombrepulsie en de spinbaankoppeling waarbij de multipletten op een kwalitatieve manier geordend zijn.
- Vergelijk de kwalitatieve ordening uit c) met onderstaande tabel (tabel 1) met experimentele gegevens. Kan je verklaren wat je opvalt in deze vergelijking? Let op: niet alle energieniveaus staan in de tabel!
- Bereken de energiecorrectie t.g.v. de Coulombrepulsie voor de term met de laagste energie. Werk de radiële delen zo ver mogelijk uit en vereenvoudig waar mogelijk.
- Bereken de energiecorrectie t.g.v. de spinbaankoppeling voor de term met de laagste energie.

Oefening 2

De kern van een atoom kan ook een intrinsiek impulsmoment I hebben. Als dit interageert met de spins van de elektronen, spreekt men van hyperfijninteracties. Voor een kern met 2 elektronen worden deze gegeven door de Hamiltoniaan $\hat{H} = A\vec{S}_1 \cdot \vec{I} + A\vec{S}_2 \cdot \vec{I}$.

- Hoeveel microtoestanden heeft het systeem? Som ze op. Je mag hierbij de microtoestanden labelen zoals je wil, maar zorg ervoor dat je goed specificeert hoe je dit doet.

Term (^{2S+1}L)	J	Energie (cm $^{-1}$)
3G	3	60 267
3G	4	60 348
3G	5	60 457
3F	2	63 375
3F	3	63 445
3F	4	63 529
1D	2	64 367
3P	0	64 616
3P	1	64 647
3P	2	64 706
1G	4	65 236

Tabel 1: Een deel van de Sc II energieniveaus

- Beschouw nu $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ en $\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$. Wat zijn dan de mogelijke waarden voor de kwantumgetallen S en F?
- Bereken de energie-eigenwaarden van het systeem.
- Bepaal de eigentoestanden in functie van de microtoestanden. Hint: de tabel met Clebsch-Gordancoëfficiënten kan hier van pas komen.
- Iets met het H_2^- atoom waar dit op kan toegepast worden.¹

Oefening 3

De molecule op het blad hierachter² heeft een "square planar" geometrie. De valentie-elektronen bevinden zich in het s-orbitaal op het centrale atoom en de p_x -, p_y - en p_z -orbitalen op de 4 buitenste atomen. De symmetriegroep is D_{4h} , waarvan de multiplicatietabel gegeven is op de achterzijde³.

- Reduceer deze voorstelling tot irreps van de groep D_{4h} .
- Bespreek de ontaarding van de energieniveaus van de moleculaire Hamiltoniaan.
- Geef de vorm van de moleculaire Hamiltoniaan in de symmetrie-aangepaste basis en bepaal hoeveel onafhankelijke matrixelementen deze bevat (onafhankelijk wil zeggen dat ze niet gelijk zijn aan een eerder voorkomend element of diens complex toegevoegde).
- Bepaal alle symmetrie-aangepaste basisfuncties die 'gerade' zijn, eigenfuncties zijn van de moleculaire Hamiltoniaan en die horen bij niet-ontaarde energieniveaus.
- Bepaal het symmetrietype van de eigentoestanden die bereikt kunnen worden door een dipooltransitie van een eigentoestand uit de irrep A_{1g} en die loodrecht op het vlak gepolariseerd zijn. Bepaal hiertoe welke irrep wordt opgespannen door z, want de dipooloperator eEz spant dezelfde irrep op.

¹Deze vraag heb ik niet goed kunnen bekijken en weet ik dus ook niet meer.

²figuur met 1 molecule centraal en 4 moleculen in een kruis er rond, hier niet ingevoegd, molecule in het xy-vlak=het blad

³hier niet gegeven, wegens 13 · 16 tabel waar ik nu even geen zin in heb