

Examen Inleiding tot de atoom- en molecuulfysica

Derde bachelor Fysica en Sterrenkunde

11 januari 2021

n.v.d.r.: De moeilijkheid van dit examen zat niet echt in de vragen zelf, maar wel in de enorme tijdsdruk. Dit examen was voorzien om opgelost te worden op 3 uur tijd. Het examen was volledig open boek.

Theorie: centrale en zelfconsistente velden

1. In tabel 6.1 zie je dat wanneer het koolstofatoom (C, $Z=6$) met het booratom (B, $Z=5$) vergelijkt, de effectieve kernlading met ongeveer 1 eenheid toeneemt voor het 1s orbitaal, maar met slechts 0.7 voor het 2p orbitaal. Geef een kwalitatieve verklaring voor deze waarneming. (1 punt)
2. Bij poly-elektronische atomen maken we gebruik van de volgende Hamiltoniaan: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ met $\hat{H}_0 =$ vgl. 6.14 en $\hat{H}_1 =$ vgl. 6.15. Daarin zie je zowel in $\hat{H}_0$ als in $\hat{H}_1$ dezelfde bijdrage opduiken, maar met een tegengesteld teken. Bespreek de fysische betekenis van deze bijdrage en waarom we dit doen in de context van perturbatietheorie. (1.5 punt)
3. In welke zin verschilt de Hartree-Fock benadering van de perturbatieve benadering van het centrale veld? Bespreek voor beide gevallen kort in welke mate de bewegingen van de verschillende elektronen gecorreleerd zijn. (1.5 punt)
4. Bespreek waarom in het geval van een np^3 configuratie de volgende termen niet optreden in het LS-koppelingsschema 4P , 4D en 2S . (1 punt)
5. Verklaar waarom de potentiaal $V(r)$ ingevoerd werd bij de central field benadering en waarom deze er vervolgens weer wordt afgetrokken. (? punten)

Oefeningen

Oefening 1: Bismut

Beschouw de $[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^3$ configuratie van het neutraal Bismut (Bi, $Z=83$) atoom en ga ervan uit dat het jj-koppelingsregime geldt.

1. Wat is het aantal Slaterdeterminanten ('microtoestanden') voor deze configuratie? (0.5 punt)
2. Welke (j, j', j'') termen treden op voor deze configuratie en met welke ontaarding? (1 punt)
3. Welke $(j, j', j'')_J$ multipletten treden op en met welke ontaarding? (0.5 punt)
4. Schets een kwalitatief energieniveauschema voor de beschouwde elektronconfiguratie waarbij je telkens aangeeft welke interactie verantwoordelijk is voor de verschillende opsplitsingen. Om de relatieve ligging van de termen te bepalen, mag je ervan uit gaan dat de j-subschil met de laagste j-waarde ook de laagste energie heeft. De relatieve ligging van de multipletten bij dezelfde term kan je op dit moment niet weten, je hoeft dit niet uit te rekenen. (0.5 punt)
5. Stel een kwalitatief correlatiediagram op voor de np^3 configuratie waarbij je de LS-multipletten met de jj-multipletten verbindt. Dankzij de regels van Hund voor LS-koppeling en het gegeven dat de verschillende lijnen elkaar niet kruisen, kan je de voorheen onbekende volgordes nu vastleggen. Geef correcte labels aan de begin- en eindpunten van iedere lijn en geef aan welk(e) kwantumgetal(len) hun betekenis behouden bij intermediaire koppeling. (1.5 punt)
6. Bespreek de geldigheid van de verschillende koppelingsschema's aan de hand van de data in de tabel. Geef een fysische interpretatie aan je vaststellingen. (1 punt)
n.v.d.r. Je kreeg een tabel met de energie van de grondtoestand en 4 aangeslagen toestanden van een aantal verschillende atomen.

Oefening 2: Spinhamiltoniaan

Stel dat de spins van een systeem van drie inequivalente elektronen met elkaar interageren volgens volgende Hamiltoniaan:

$\hat{H}_0 = \alpha \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 + \beta (\hat{S}_1 + \hat{S}_2) \cdot \hat{S}_3$ met $\alpha \cdot \beta > 0$ en $\hat{S}_i$ de spinoperator van het i-de elektron.

1. Hoeveel microtoestanden heeft dit systeem? Som ze op. Je kan hierbij een eigen notatie '+' en '-' gebruiken, maar specificeer deze duidelijk. (1 punt)
2. Als $\hat{S}_{12} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ en $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2 + \hat{S}_3$, welke waarden kunnen S_{12} en S dan aannemen? (0.5 punt)
3. Bereken de energie-eigenwaarden van dit systeem en geef de ontaarding van de verschillende niveaus. (1 punt)
4. Bepaal alle eigenfuncties van het niveau met de hoogste energie in functie van de microtoestanden. De tabel met Clebsch-Gordan coëfficiënten kan het werk verlichten. (1.5 punt)
5. Stel dat een zwak magneetveld $\vec{B}$ wordt aangelegd zodat de Hamiltoniaan nu $\hat{H} = \hat{H}_0 + \sum_{i=1}^3 g\mu_B \vec{B} \cdot \hat{S}_i$ is. Als $g\mu_B B \ll \alpha\beta$, wat zijn dan (benaderend) de energieën van de eigenfuncties uit het vorige puntje? (1 punt)

Oefening 3: Groepentheorie (5 punten)

Gegeven: een molecule met D2d symmetrie en een tabel met de werking van de symmetrie-elementen op de basisfuncties.

1. Bepaal het karakter van elk symmetrie-element en reduceer de voorstelling.
2. Welke basisfuncties kunnen overlap vertonen met y en zijn orthogonaal met x?
3. Wat weet je over de ontaarding van de energieniveaus? Welke vorm heeft de Hamiltoniaan in de symmetrie-aangepaste basis? Hoeveel verschillende elementen bevat de Hamiltoniaan als deze reëel is en je mag veronderstellen dat alle elementen die niet nul zijn wegens symmetrie ook effectief niet nul zijn?