

# Atoom- en molecuulfysica

---

 [tuyaux.winak.be/index.php/Atoom-\\_en\\_molecuulfysica](http://tuyaux.winak.be/index.php/Atoom-_en_molecuulfysica)

## Atoom- en molecuulfysica

---

Richting	<u>Eysica</u>
----------	---------------

Jaar	<u>MFYS</u>
------	-------------

## Bespreking

---

Het examen werd opgesteld door prof. Van Doorslaer en omvat zowel theorie als oefeningen. De tijd beschikbaar voor het examen is 4 uur zoals gebruikelijk, waarvan ongeveer 15 minuten mondelinge toelichting. Het loont dit vak te zien als een geheel met het vak Symmetrie in de kwantummechanica daar het belangrijke onderdeel over termen een toepassing van representatietheorie is.

Bij het mondeling gedeelte worden vragen gesteld die slechts licht te maken hebben met de vragen op het schriftelijk gedeelte. Het is dus niet nodig om het gehele schriftelijk examen al af te hebben alvorens naar het mondeling te gaan.

## Puntenverdeling

---

Alle punten staan op het examen. Er is geen tussentijdse evaluatie.

## Examenvragen

---

### Academiejaar 2021-2022 1<sup>ste</sup> zit

---

#### Groep A

---

1.

1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $ns1mp3ns1mp3$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht te worden).
2. Verifiëer je resultaat door de termontaarding met de configuratieontaarding te vergelijken.
3. Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?

2. We beschouwen een atoom met meerdere elektronen met kernspin. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppeling. Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $\mathbf{H}$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
3. Veronderstel nu een intermediair magnetisch veld en een meer-elektronensysteem met  $L=12$  en  $S=1$ , kern zonder kernspin. Stel alle seculiere vergelijkingen op nodig om de energiesplitsing ten gevolge van elektron Zeemaninteractie en spin-baankoppeling te bepalen.
4. Niet alle elektronische overgangen zijn stralende overgangen. Leid de selectieregels voor elektrische dipoolovergangen af in het geval van een veel-elektronatoom. Leg in die context uit wat spinverboden overgangen zijn.
5. Bespreek hoe we de moleculaire golf functies van  $H_2^+$  kunnen berekenen uitgaande van de atomaire golf functies. Vermeld ook hoe die theorie heet waarvan je gebruik maakt.

Hulp: De elektronische golf functie van een  $1s$ -orbitaal van een waterstofatoom met kern op RARA wordt gegeven door

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-|q-R_A|}$$

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-|q-R_A|}$$

## Groep B

---

1.
  1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $np^4md^9np^4md^9$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht te worden).
  2. Verifieer je resultaat door de termontaarding met de configuratieontaarding te vergelijken.
  3. Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
  4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
2. We beschouwen een atoom met meerdere elektronen zonder kernspin in een sterk magneetveld. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppeling. Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $\mathbf{H}$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.

3. Veronderstel een meer-elektronsysteem met kernspin in een extern statisch magneetveld. Bepaal de energiesplitsing ten gevolge van de Zeeman- en hyperfijninteracties van het systeem. Hierbij zijn alle Zeemaninteracties zwakker dan de hyperfijninteracties.
4. We bekijken het licht van een kwiklamp uitgezonden bij de overgang  $3D2 \rightarrow 3P1$ . Waarom is dit een radiatieve overgang? Bespreek dit laatste a.d.h.v. de selectieregels. Nu plaatsen we de lamp in een magneetveld. Welk effect zullen we merken op het uitgezonden licht? Bespreek dit ook in termen van de polarisatie van het uitgezonden licht. De Landé factor is gegeven door  $g_J = 1 + J(J+1) + S(S+1) - L(L+1) / 2J(J+1)$ .
5. Bespreek het Hohenberg-Kohn theorema.

## Academiejaar 2020-2021 2<sup>de</sup> zit

---

Prof. Sabine Van Doorslaer

1.
  1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $mp^3mp^3$ . (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht te worden.)
  2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
  3. Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regel van Hund.
  4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
  5. Leg uit hoe de berekening van de energie van deze grondterm door de termanalyse vereenvoudigd wordt.
2. We beschouwen een atoom met meerdere elektronen zonder kernspin. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russell-Saunderskoppeling? Fundeer je antwoord door aan te tonen wat de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $HH$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektronhamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid te worden.
3. Veronderstel nu een intermediair magnetisch veld en een meer-elektronsysteem met  $L=1$  en  $S=1$ . Stel alle seculiere vergelijkingen op nodig om de energiesplitsing ten gevolge van elektron-Zeemaninteractie en spin-baankoppeling te bepalen.
4. Niet alle elektronische overgangen zijn stralende overgangen. Bespreek de selectieregels voor elektrische dipoolovergangen in het geval van een veel-elektronatoom. Leg in die context ook uit wat 'spinverboden' overgangen zijn.

5. Bespreek het Hohenberg-Kohn theorema.

## Academiejahr 2020-2021 1<sup>ste</sup> zit

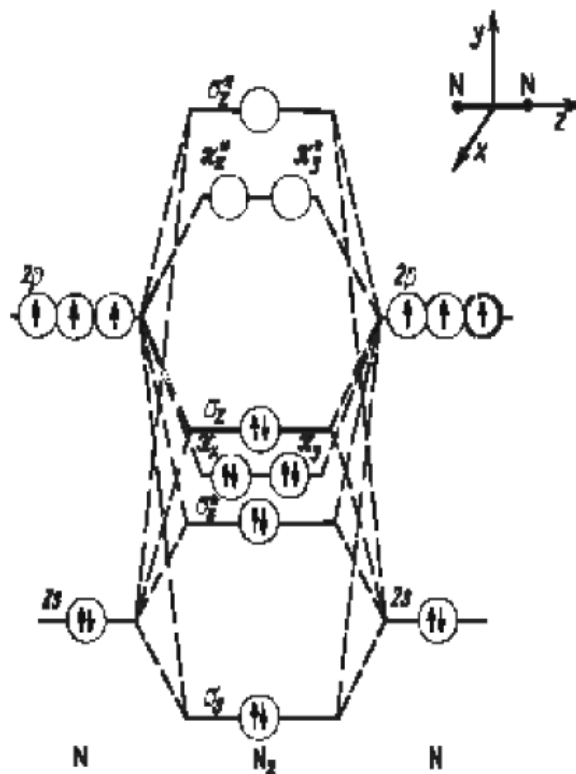
---

Prof. Sabine Van Doorslaer

1.

1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $mf2mf2$ . (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht te worden.)
  2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
  3. Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regel van Hund.
  4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
  5. Leg uit hoe de berekening van de energie van deze grondterm door de termanalyse vereenvoudigd wordt.
2. Beschouw een 1-elektron atoom (kern zonder kernspin). Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering? Fundeer je antwoord door aan te tonen wat de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatistische en magnetische interacties op de commutatierelaties van de hamiltoniaan en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden.
3. Beschouw een atoom met meerdere elektronen en een kernspin in een magneetveld. Geef de hamiltoniaan voor deze situatie. Toon hoe je de energiesplitsing ten gevolge van de Zeeman- en hyperfijnbijdragen zou berekenen voor een situatie waarbij de elektron-Zeemanterm het grootst is en de hyperfijn- en kern-Zeemanbijdragen vergelijkbaar in grootte zijn. Alle andere bijdragen zijn groter. We gaan uit van een LS-koppeling en  $I=1/2, L=1/2, S=1/2, J=1/2$ .
4. We bekijken het licht van een kwiklamp uitgezonden bij de overgang  $3D2 \rightarrow 3P1$ . Waarom is dit een radiatieve overgang? Bespreek dit laatste a.d.h.v. de selectieregels. Nu plaatsen we de lamp in een magneetveld. Welk effect zullen we merken op het uitgezonden licht? Bespreek dit ook in termen van de polarisatie van het uitgezonden licht.

5. Hieronder zie je een schets van het MO energieniveauschema van  $N_2N_2$ . Dit ziet er anders uit dan het MO schema van  $O_2O_2$ . Wat is er zo ongewoon? Verklaar dit aan de hand van wat je weet over het LCAO principe. (mondelinge toelichting prof: ik verwacht een kort antwoord van ongeveer 4 regels waarin je het LCAO principe uitlegt)



### Academiejaar 2019-2020 1<sup>ste</sup> zit

1.
  1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $np^5md^8$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht te worden).
  2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
  3. Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regel van Hund.
  4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
2. Leid de relatie af tussen de spin-baankoppelingparameter  $\lambda\lambda$  en de 1-elektron spin-baankoppelingsconstanten en gebruik deze relatie om  $\lambda\lambda$  te berekenen voor de  $3P$  grondterm van de  $np^4$  configuratie.

3.

1. We beschouwen een atoom met meerdere elektronen in een zwak magnetisch veld. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppelingsbenadering? Fundeer je antwoord door aan te tonen wat de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierregels van  $\mathbf{H}$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
  2. Leid de uitdrukking af voor de energiesplitsing ten gevolge van de Zeemaninteractie voor het bovenstaande geval
  3. We bekijken het groene licht uitgezonden door de overgang  $3S_1 \rightarrow 3P^o_2$  bij een kwiklamp. Waarom is dit een radiatieve overgang? Bespreek dit laatste aan de hand van de selectieregels.
  4. We plaatsen nu de kwiklamp in een zwak magneetveld. Gebruik de uitdrukking uit vraag (2) om het splitsingspatroon voor beide niveaus af te leiden.
  5. Bespreek aan de hand van het energieniveauschema dat je uit vraag (4) kunt afleiden, het effect op het uitgezonden licht.
4. Bespreek de moleculaire orbitaaltheorie voor de  $H_2^+$  molecule

### Academiejahr 2018-2019 1<sup>ste</sup> zit

---

1.

1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $mf12mf12$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
  2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken
  3. Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund
  4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondbasisniveau?
2. Stel een effectieve spin-baan Hamiltoniaan op die als goede benadering gebruikt kan worden binnen het LS-koppelingsschema. Duid aan tot welke orde de benadering klopt.

3.

1. Beschouw een atoom met meerdere elektronen met een kernspin. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppeling. Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $HH$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
2. Bij aanleg van een sterk extern magneetveld, bereken hoe de energieniveaus opsplitsen tgv de zeeman en hyperfijn interacties. Je mag ervan uitgaan dat deze interacties kleiner zijn dan alle andere interacties
4. Een natriumlamp wordt in een magneetveld geplaatst. We bekijken het licht uitgezonden door de overgang  $3D3 \rightarrow 3P2$ . Welk effect zullen we merken op het uitgezonden licht? Bespreek dit ook in termen van de polarisatie van het uitgezonden licht. Waarom is dit een radiatieve overgang? Bespreek dit laatste aan de hand van de selectieregels.
5. Bespreek de rotatie en vibratie van diatomaire moleculen. Welke straling gebruiken we om rotationele en vibrationele overgangen te induceren? Formule 6.35 en 6.40 zijn gegeven.

### Academiejahr 2017-2018 2<sup>de</sup> zit

---

1.

1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $nd^9np^4$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
2. Verifieer je resultaat door de termontbindingen met de configuratieontbinding te vergelijken
3. Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund
4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?  
*mondeling: Wat is het nut van deze termen te bepalen, waarom berekenen we niet gewoon rechtstreeks de differentiaalvergelijkingen?*
2. Bespreek de begrippen directe en uitwisselingsintegraal in de context van het He atoom in een aangeslagen toestand ( $ns1ms1ns1ms1$  - configuratie).  
*mondeling: Waarom is noemen we de afleiding bij de Einsteincoëfficiënten semi-klassiek? (i.e. welk deel is klassiek). Van welke fout zijn we in de semi-klassieke afleiding uitgegaan? Hoe hebben we voor die fout gecorrigeerd?*

3.

1. Beschouw een atoom met meerdere elektronen zonder kernspin in een sterk magneetveld. Welke kwantumgetallen zijn exact, en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppeling. Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $H_H$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
2. Bereken de energiesplitsing t.g.v. de hyperfijninteractie voor een atoom met meerdere elektronen met een kernspin.  
*mondeling: Indien we wel een kernspin hadden, hebben we 2 speciale gevallen gezien (S-orbitalen). Één van die twee gevallen kan je ook perfect klassiek afleiden. Hoe zat dat juist?*
4. Een natriumlamp wordt in een magneetveld geplaatst. We bekijken het licht uitgezonden door de overgang  $2D_{5/2} \rightarrow 2P_{3/2}$  en  $2D_{3/2} \rightarrow 2P_{3/2}$ . Welk effect zullen we merken op het uitgezonden licht? Bespreek dit ook in termen van de polarisatie van het uitgezonden licht. Waarom is dit een radiatieve overgang? Bespreek dit laatste aan de hand van de selectieregels.
5. Als je de MO energieschema's van  $O_2$  en  $N_2$  vergelijkt, is er een opvallend verschil. Leg dit uit aan de hand van wat je weet over LCAO  
*mondeling: We hebben in het laatste hoofdstuk Bohr en Oppenheimer meermaals tegengekomen. Wat is de Bohr-oppenheimer approximatie, en hoe is dat gelinkt aan het BO-oppervlak?*

## Academiejahr 2017-2018 1<sup>ste</sup> zit

---

1.

1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $md^7md^7$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken
3. Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund
4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?  
*mondeling: Wat is het nut van deze termen te bepalen, waarom berekenen we niet gewoon rechtstreeks de differentiaalvergelijkingen?*



2. De drie processen die bijdragen tot de stralingsovergangen tussen atomaire niveaus worden gekarakteriseerd door de Einstein-coëfficiënten. Definieer deze coëfficiënten en toon kort aan hoe het verband tussen deze coëfficiënten kan afgeleid worden (de wet van Planck wordt gegeven als hulp). Gebruik vervolgens deze relaties om af te leiden bij welke golflengte voor een gegeven temperatuur  $T$  spontane emissie vergelijkbaar wordt met de thermische geïnduceerde emissie.

*mondeling: Van welke fout zijn we in de semi-klassieke afleiding uitgegaan? Hoe hebben we voor die fout gecorrigeerd?*

3.

1. Beschouw een atoom met meerdere elektronen zonder kernspin in een zwak magneetveld. Welke kwantumgetallen zijn exact, en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppeling. Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $H$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
2. Veronderstel nu een intermediair magnetisch veld en een systeem met  $L=1/2$  en  $S=1$ . Stel alle seculiere vergelijkingen op, nodig om de energiesplitsing ten gevolge van de elektron-zeeman interactie en spin-baankoppeling te bepalen  
*mondeling: Indien we wel een kernspin hadden, hebben we 2 speciale gevallen gezien (S-orbitalen). Één van die twee gevallen kan je ook perfect klassiek afleiden. Hoe zat dat juist?*
4. Bewijs dat de Slaterdeterminant  $\Psi(1,2)\Psi(1,2)$  geen eigenfunctie is van  $L_z, l_z, i$ . Wat zegt dit over de symmetrie-eigenschappen van de Hamiltoniaan? Van welke draaiimpuls is  $\Psi(1,2)\Psi(1,2)$  nog wel een eigenfunctie?
5. Bespreek het Hohenberg-Kohn theorema
  - *mondeling: Waarom gebruiken we een oplossingsmethode als Hohenberg-Kohn, en berekenen we niet gewoon exact de Hamiltoniaan?*
  - *mondeling: Hoe werken de iteraties juist bij de optimalizatie van de energie?*

## Academiejahr 2016-2017 1<sup>ste</sup> zit

---

### Groep A

---

1.

1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $md9np4md9np4$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken
3. Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund
4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?

2. Leid de relatie af tussen de spin-baankoppelingsparameter  $\lambda$  en de 1-elektron spin-baankoppelingsconstanten en gebruik deze relatie om  $\lambda$  te berekenen voor de 5D5D grondterm van de  $nd^4nd^4$  configuratie.
3. Beschouw een atoom met meerdere elektronen zonder kernspin in een zwak magneetveld. Welke kwantumgetallen zijn exact, en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppeling. Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatistische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $\mathbf{H}_H$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
  1. Leid de uitdrukkingen af voor de opsplitsing van de energieniveaus tengevolge van de Zeemaninteractie in het bovenstaande getal.
4. Een natriumlamp wordt in een magneetveld geplaatst. We bekijken het licht uitgezonden door de overgang  $2D_{5/2} \rightarrow 2P_{3/2}$ . Welk effect zullen we merken op het uitgezonden licht? Bespreek dit ook in termen van de polarisatie van het uitgezonden licht. Waarom is dit een radiatieve overgang? Bespreek dit laatste aan de hand van de selectieregels.
5. Bespreek het Hohenberg-Kohn theorema

## Groep B

---

1.
  1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $md^8ns^1md^8ns^1$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
  2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken
  3. Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund
  4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
2. De drie processen die bijdragen tot de stralingsovergangen tussen atomaire niveaus worden gekarakteriseerd door de Einstein-coëfficiënten. Definieer deze coëfficiënten en toon kort aan hoe het verband tussen deze coëfficiënten kan afgeleid worden (de wet van Planck wordt gegeven als hulp). Gebruik vervolgens deze relaties om af te leiden bij welke golflengte voor een gegeven temperatuur  $T$  spontane emissie vergelijkbaar wordt met de thermische geïnduceerde emissie.
3. Beschouw een atoom met meerdere elektronen en zonder kernspin in een sterk magneetveld. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppeling? Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatistische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $\mathbf{H}_H$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.

4. Beschouw een atoom met meerdere elektronen en een kernspin. Toon hoe je de energiesplitsing ten gevolge van de Zeeman- en hyperfijnbijdragen zou berekenen voor een situatie waarbij de elektron-Zeemanterm het grootst is en de hyperfijn- en kern-Zeemanbijdragen vergelijkbaar in grootte zijn. We gaan uit van LS koppeling en  $I=1/2$ ,  $J=1/2$ .
5. Bespreek de moleculaire orbitaaltheorie aan de hand van het  $H_2^+$  voorbeeld

## Academiejahr 2015-2016 1<sup>ste</sup> zit

---

### Engelstalige master

---

1. (2.5 pts, easy and without surprise but not many points compared to the time it takes)
  1. Determine the terms that can be derived from the configuration  $nd^2mp^1$  (Spin-orbit coupling should not be taken into account at this point).
  2. Verify your result by comparing the term degeneracies with the configuration degeneracies.
  3. Determine the ground term in the above configurations using the rules of Hund
  4. Consider now the spin-orbit interaction. In what levels will the ground term be split ? What is the ground level ?
2. (1pt) Explain the meaning of direct and exchange integral in the context of the He atom in an excited state ( $ns^1ms^1$  configuration).
3. (6 pts, quite previsible and also the most points, so definitely the one you want to be good at)
  1. (4/6 pts) Assume an atom with several atom with several electrons in a weak magnetic field. Which quantum numbers are exact and which ones are still valid by approximation ? Limit your discussion to the Russel-Saunders coupling case and to an atom with no nuclear spin. Support your answer by showing what the introduction of the different electrostatic and magnetic interactions has as a consequence on the commutation relations of H. Show also what subsequent couplings of operators have to be considered. You can use here the commutation relations for the 1-electron Hamiltonian without having to prove them first.
  2. (2/6 pts) Assume that the above atom has a nucleus with nuclear spin. Derive the energy contributions of the hyperfine and Zeeman terms in the Hamiltonian.
4. (2.5 pts) Discuss the selection rules for the electric dipole transitions in a many-electron atom. You can assume LS coupling.
5. (3 pts) What is the LCAO method ? Clarify this method using the simple example of an  $H_2^+$  molecule.

### Groep B

---

1.

1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $mp5md8mp5md8$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
3. Bepaal de grondterm in bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?

*Mondeling: Waarom is het nuttig deze termen te berekenen? ...*

2. In de semi-klassieke afleiding van de Einstein-coëfficiënten wordt m.b.v. de tijdsafhankelijke kwantummechanica een stel gekoppelde differentiaalvergelijkingen afgeleid die de basis vormen voor de berekening van de overgangssnelheden en dus de Einstein-coëfficiënten. Leid deze vergelijkingen af voor een algemene interactiehamiltoniaan. Verklaar wat het verband is tussen de Einstein-coëfficiënten en de tijdsafhankelijke coëfficiënten in de gekoppelde differentiaalvergelijking.

*Mondeling: Vragen over waarom de semi-klassieke afleiding werkt, welke aannames etc.*

3.

1. Beschouw een atoom met meerdere elektronen en zonder kernspin in een sterk magneetveld. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppelingsbenadering? Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $H_H$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
2. Bereken de energiesplitsing ten gevolge van de interacties met de kern af.  
*Mondeling: Vragen over het geval van S-orbitalen. Welk eenvoudig model hebben we gebruikt daarvoor?*
4. Bewijs dat de Slaterdeterminant  $\Psi(1,2,3)\Psi(1,2,3)$  geen eigenfunctie is van  $L_z, l_z, i$ . Wat is het verband met vraag 3?
5. Wat is de Born-Oppenheimerbenadering?  
*Mondeling: Born-Oppenheimeroppervlak.*

**Academiejaar 2014-2015 2<sup>de</sup> zit**

---

**Groep A**

---

1.

1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $mf12mf12$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
  2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
  3. Bepaal de grondterm in bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
  4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
2. Wat houdt de LCAO methode in? Verduidelijk deze methode aan de hand van het voorbeeld van een  $H_2^+$  molecule.
3. Beschouw een atoom met meerdere elektronen en zonder kernspin in een sterk magneetveld. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppelingsbenadering? Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van HH en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
4. Leid in de Russel-Saunderskoppelingsbenadering de relatie tussen de spin-baankoppelingsparameter  $\lambda$  en de 1-elektron spin-baankoppelingsparameters af.
5. Bespreek de selectieregels voor elektrische dipoolovergangen in een veel-elektronenatoom. Je mag de LS-koppeling aannemen.

## Groep B

---

1.

1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $md7md7$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
  2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
  3. Bepaal de grondterm in bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
  4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
2. Hoe wordt de uitdrukking voor de interactiehamiltoniaan opgesteld in de semi-klassieke afleiding van de Einstein-Coëfficiënten?
3. Beschouw een atoom met meerdere elektronen en zonder kernspin in een sterk magneetveld. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppelingsbenadering? Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van HH en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.

4.

1. Veronderstel een atoom zonder kernspin met meerdere elektronen in een zwak uitwendig magneetveld. Leid voor dit geval de uitdrukking voor de energiesplitsing ten gevolge van de elektron Zeemaninteractie af.
2. Een Na-atoom zendt licht uit bij de overgang van de aangeslagen  $3p^1$  configuratie ( $2P^1/2$ ) naar de grondconfiguratie  $3s^1$  ( $2S^1/2$ ). Pas de uitdrukking uit vraag 4a nu toe om de geobserveerde spectraallijnen en hun polarisaties te bespreken voor het geval waar het Na-atoom in een zwak uitwendig magneetveld geplaatst wordt. Bereken ook de Landé g-factor(en) in dit geval.
5. Bespreek de moleculaire orbitaaltheorie aan de hand van een  $H_2^+$  molecule.

## Academiejahr 2014-2015 1<sup>ste</sup> zit

---

### Groep A

---

1.

1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $mp^3mf^1$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
3. Bepaal de grondterm in bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
2. Bewijs het eerste theorema van Hohenberg-Kahn.
3. Beschouw een atoom met meerdere elektronen met een kernspin. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russell-Saunderskoppeling. Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van HH en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
4. Veronderstel een atoom met een kern met een kernspin in een extern statisch homogeen magneetveld. Bereken de energitermen tengevolge van de hyperfijn- en Zeemanbijdragen in de Hamiltoniaan. Je mag uitgaan van de zwakke limiet (dus een zwak magneetveld).
5. Verklaar waarom het niet evident is dat het resonantiefluorescentie-experiment werkt (resonantiefluorescentie-experiment = absorptie van een foton door een atoom, waarbij het foton uitgezonden werd door een atoom van hetzelfde type). Waarom werkt het experimenteel wel in het visuele gebied?

### Groep B

---

1.
  1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $md7md7$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht te worden).
  2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken
  3. Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund
  4. Nemen we nu de spin-baan interactie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
2. Hoe wordt de uitdrukking voor de interactiehamiltoniaan opgesteld in de semi-klassieke afleiding van de Einstein-coëfficiënten?
3. Beschouw een atoom met meerdere elektronen en een kernspin. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppelingsbenadering? Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatistische en magnetische interacties op de commutatierregels van HH en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid te worden.
4.
  1. Veronderstel een atoom zonder kernspin met meerdere elektronen in een zwak uitwendig magneetveld. Leid voor dit geval de uitdrukking voor de energiesplitsing ten gevolge van de elektron Zeemaninteractie af.
  2. Een Na-atoom zendt licht uit bij de overgang van de aangeslagen  $3p13p1$  configuratie ( $2P1/22P1/2$ ) naar de grondconfiguratie  $3s13s1$  ( $2S1/22S1/2$ ). Pas de uitdrukking uit vraag 4a nu toe om de geobserveerde spectraallijnen en hun polarisaties te bespreken voor het geval waar het Na-atoom in een zwak uitwendig magneetveld geplaatst wordt. Bereken ook de Landé g-factor(en) in dit geval.
5. Bespreek de moleculaire orbitaaltheorie aan de hand van een  $H_2^+$  molecule.

### Academiejaar 2013-2014 1<sup>ste</sup> zit

---

1.
  1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $mf2np1mf2np1$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
  2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
  3. Bepaal de grondterm in bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
  4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
2. Leid de relatie af tussen  $\lambda\lambda$ (veel elektronen) en de één-elektron spin-baankoppeling parameters.

3.
  - Beschouw een atoom met meerdere elektronen met een kernspin. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppeling. Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatistische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $H$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
  - Bereken nu de energiesplitsing tengevolge van de spin-baankoppeling- en Zeemanbijdragen tot de Hamiltoniaan.
4. Bespreek de selectieregels voor elektrische dipoolovergangen in een veel-elektronenatoom. Je mag de LS koppeling aannemen.
5. Leg kort het principe van Kohn-Sham bij DFT uit.

### Academiejaar 2012-2013 1<sup>ste</sup> zit

---

1.
  1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $mf2ns1mf2ns1$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
  2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
  3. Bepaal de grondterm in bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
  4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
2. Bespreek de begrippen directe en uitwisselingsintegraal in de context van het He atoom in een aangeslagen toestand(  $ns1ms1ns1ms1$  - configuratie).
3.
  - Beschouw een veel-elektronatoom in een sterk magneetveld. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppeling? Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatistische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $H$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
  - Bereken de energiesplitsing t.g.v. de hyperfijninteractie voor een atoom met meerdere elektronen met een kernspin.
4. Leg de Born-Oppenheimerapproximatie in woorden uit.



5.

- De drie processen die bijdragen tot de stralingsovergangen tussen atomaire niveaus worden gekarakteriseerd door de Einstein-coëfficiënten. Definieer deze coëfficiënten en toon kort aan hoe het verband tussen deze coëfficiënten kan afgeleid worden (de wet van Planck wordt gegeven als hulp).
- Hoe wordt de uitdrukking voor de interactiehamiltoniaan opgesteld in de semi-klassieke afleiding van de Einstein-coëfficiënten?

### Academiejaar 2011-2012 1<sup>ste</sup> zit

---

1.

1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $nf^2n\bar{f}^2$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
3. Bepaal de grondterm in bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?

2. Bij de behandeling van atomen met meerdere elektronen hebben we aanvankelijk de golffuncties als eenvoudige productfuncties van de één-elektron golffuncties benaderd (de zogenaamde Hartreefuncties). Dit zijn weliswaar mathematisch correcte oplossingen, maar ze zijn fysisch niet juist. Waarom niet en hoe zien de correcte oplossingen voor de golffuncties van het veel-elektronatoom er dan wel uit?

3.

- Beschouw een atoom met meerdere elektronen met een kernspin. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russell-Saunderskoppeling. Funder je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $H$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
- Veronderstel dat dit atoom in een sterk magnetisch veld geplaatst wordt, waarbij het sterk veld gedefinieerd wordt als een veld dat aanleiding geeft tot een elektron Zeemaninteractie die aanzienlijk groter is dan de hyperfijninteractie, maar niet groter dan de spin-baankoppeling. Bereken nu de energiesplitsing tengevolge van de hyperfijn- en Zeemanbijdragen tot de Hamiltoniaan.

4. Bespreek de selectieregels voor elektrische dipoolovergangen in een veel-elektronenatoom. Je mag de LS koppeling aannemen.

5. Bespreek de moleculaire orbitaaltheorie aan de hand van het  $H+2H_2^+$  voorbeeld.

### Academiejaar 2010-2011 1<sup>ste</sup> zit

---

1.
  1. Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $md2nd1md2nd1$  (Spin-baankoppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht worden).
  2. Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
  3. Bepaal de grondterm in bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
  4. Nemen we nu de spin-baaninteractie in acht. In welke niveaus splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
2. Uit de semi-klassieke afleiding van de einsteincoëfficiënten volgt dat de tijdsafhankelijke coëfficiënt  $C_2(t)$  een tijdsafhankelijkheid vertoont die in strijd is met wat verwacht werd ( $|C_2(t)|^2$  is evenredig met  $t^2$ ).
  - Welke tijdsafhankelijkheid hadden we verwacht en waarom.
  - Hoe kunnen we de verwachte tijdsafhankelijkheid bekomen?
  - Leg ook uit wat fysisch niet correct is aan de semi-klassieke afleiding en verklaar waarom ze uiteindelijk toch tot een correct resultaat kan leiden.
3.
  1. Beschouw een atoom met meerdere elektronen met een kernspin.  
Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppeling.  
Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van  $H$  en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de 1-elektron Hamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid worden.
  2. Stel dat we nu een meer-elektronatoom zonder kernspin in een sterk magnetisch veld plaatsen.  
Welke energiecorrectie veroorzaakt dit?
4. Bespreek de moleculaire orbitaaltheorie aan de hand van het  $H_2^+$  molecuul.
5. Bij de behandeling van atomen met meerdere elektronen hebben we aanvankelijk de golffuncties als eenvoudige productfuncties van de één-elektron golffuncties benaderd (de zogenaamde Hartreefuncties). Dit zijn weliswaar mathematisch correcte oplossingen, maar ze zijn fysisch niet juist.  
Waarom niet en hoe zien de correcte oplossingen voor de golffuncties van het veel-elektronatoom er dan wel uit?

1.
  - Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $md3ns1md3ns1$  (Spin-baan koppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht te worden).
  - Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
  - Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
  - Nemen we nu de spin-baan interactie in acht. In welke niveau's splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?
2. Bespreek de begrippen directe en uitwisselingsintegraal in de context van het He atoom in een aangeslagen toestand(  $ns1ms1ns1ms1$  - configuratie). Wat zijn de eigenwaarden?
3.
  1. Beschouw een atoom met meerdere elektronen (Zonder kernspin). Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering in de Russel-Saunderskoppeling? Fundeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van de Hamiltoniaan en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de een-elektronhamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid te worden.
  2. Stel dat we nu te maken hebben met een atoom met kernspin in een magnetisch veld (nog steeds in LS benadering). Welke Hamiltoniaantermen moeten dan toegevoegd worden? Leid de corresponderende energieën af voor de sterke veldlimiet( de zogenaamde Back-Goudsmitlimiet)
4. In de semi-klassieke afleiding van de Einstein-coëfficiënten wordt mbv de tijdsafhankelijke kwantummechanica een stel gekoppelde differentiaalvergelijkingen afgeleid die de basis vormen voor de berekening van de overgangssnelheden en dus de Einstein-coëfficiënten. Leid deze vergelijkingen af voor een algemene interactiehamiltoniaan. Verklaar wat het verband is tussen de Einstein-coëfficiënten en de tijdsafhankelijke coëfficiënten in de gekoppelde differentiaalvergelijking.
5. Bewijs dat de Slaterdeterminant  $\Psi(1,2,3)\Psi(1,2,3)$  geen eigenfunctie is van  $I_z, iI_z, i$ . Wat is het verband met vraag 3?

## Academiejaar 2007-2008 1<sup>ste</sup> zit

---

1.
  - Bepaal de termen afgeleid van de configuratie  $nd2mp1nd2mp1$  (Spin-baan koppeling hoeft hier nog niet in rekening gebracht te worden).
  - Verifieer je resultaat door de termontaardingen met de configuratieontaarding te vergelijken.
  - Bepaal de grondterm in de bovenstaande configuratie volgens de regels van Hund.
  - Nemen we nu de spin-baan interactie in acht. In welke niveau's splitst de grondterm dan? Wat is het grondniveau?

2. In de semi-klassieke afleiding van de Einstein-coëfficiënten wordt met behulp van de tijdsafhankelijke kwantummechanica een stel gekoppelde differentiaalvergelijkingen afgeleid die de basis vormen voor de berekening van de overgangssnelheden en dus de Einsteincoëfficiënten. Leid deze vergelijkingen af voor een algemene interactiehamiltoniaan. Voer vervolgens de uitdrukking voor de interactiehamiltoniaan in deze vergelijkingen in en toon aan hoe die vergelijkingen vereenvoudigd worden.
- 3.
1. Beschouw een atoom met meerdere elektronen geplaatst in een zwak magnetisch veld. Welke kwantumgetallen zijn exact en welke gelden nog bij benadering? Beperk je bespreking tot de Russell-Saunders-koppeling. Fondeer je antwoord door aan te tonen welke de gevolgen zijn van het invoeren van de verschillende elektrostatische en magnetische interacties op de commutatierelaties van de Hamiltoniaan en welke opeenvolgende koppelingen van operatoren moeten doorgevoerd worden. Je mag uitgaan van de commutatierelaties van de een-elektronhamiltoniaan, dus deze hoeven niet meer afgeleid te worden.
  2. Leid ook de uitdrukking voor de opsplitsing van de energieniveaus ten gevolge van het elektron-Zeemaneffect af voor het bovenstaand geval.
4. Leg de Born-Oppenheimerbenadering uit. Wat is een Born-Oppenheimer-opervlak?

Categorieën:

- Fysica
- MFYS