

Inleiding tot de atoom- en molecuulfysica (C000919)

Cursusomvang (nominale waarden; effectieve waarden kunnen verschillen per opleiding)

Studiepunten 6.0

Studietijd 180 u

Contacturen

52.5u

Aanbodsessies in academiejaar 2023-2024

A (semester 2)

Nederlands

Gent

Lesgevers in academiejaar 2023-2024

Joos, Jonas

WE04

Verantwoordelijk lesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2023-2024

[Bachelor of Science in de fysica en de sterrenkunde](#)

stptn

aanbodssessie

6

A

Onderwijstalen

Nederlands

Trefwoorden

Atoomfysica, kwantummodellering van atomaire structuur, groepentheorie toegepast op moleculen.

Situering

Deze cursus heeft tot doel (i) het opbouwen van het kwantummechanische formalisme vereist voor de theoretische interpretatie van atomaire spectra en (ii) het toepassen van groepentheorie op moleculaire systemen om een basisinzicht te verwerven in de relatie tussen de symmetrie van molecules en moleculaire spectra.

Inhoud

- Koppeling van angulaire momenta (Clebsch-Gordoncoëfficiënten).
- Benaderingstechnieken: tijdsafhankelijke perturbatietheorie (voor ontaarde en niet-ontaaarde niveaus); variatietheorie (Rayleighratio, Rayleigh-Ritzmethode); stelling van Hellman en Feynman; tijdsafhankelijke storingsrekening.
- Atomaire structuur en spectra van waterstof: interpretatie van de analytische oplossing voor de niet-relativistische, spinvrije Hamiltoniaan; verwachtingswaarde van radiale coördinaat; perturbatieve behandeling van spinbaankoppeling en relativistische effecten (fijnstructuur); invloed van magnetveld, zwak (Zeemaneffect), sterk (Paschen-Backeffect) en intermediair; magnetische en elektrische dipooltransities.
- Atomaire structuur en spectra van helium: Coulombintegraal; exchange-integraal; geëxciteerde toestanden; Pauliprincipe; Slaterdeterminant
- Polyelektronische atomen en ionen: *shielding*, centralelveldbenadering, Hartree-Fock theorie, perturbatieve behandeling van Coulombinteractie en spinbaankoppeling in Russell-Saunderskoppelingsschema en jj-koppelingsschema; microtoestanden, termsymbolen, configuratietabellen; regels van Hund; diagonale-somregel; invloed van externe magnetische velden (Zeemaneffect) en elektrische velden (Starkeffect).
- Introductie tot groepentheorie: symmetrieoperaties en -elementen; symmetrieclassificatie van molecules; multiplicatietabellen; matrixrepresentaties; karakters en klassen; niet-reduceerbare representaties; groot en klein orthogonaliteitstheorema; reductie van representaties; symmetrie-aangepaste basis; symmetrietransformatie van orbitaalfuncties; decompositie van een direct-product-basis; elektronische transitiewaarschijnlijkheden, dipoolmomenten, overlapintegralen.
- Inleiding tot de molecuulfysica.

Begincompetenties

Niet-relativistische kwantummechanica; elektromagnetisme

Eindcompetenties

- 1 De fysische kernbegrippen en basismethoden van de atoom- en molecuulfysica kennen en op een gepast abstractieniveau gebruiken.
- 2 Grondige basiskennis hebben en hanteren van klassieke fysicadomeinen (zoals de kwantummechanica, golven en optica, elektromagnetisme) nodig voor de studie van de atoom- en molecuulfysica.
- 3 Ruime basiskennis en praktische vaardigheid hebben van de wiskunde bij het oplossen van fysische problemen.
- 4 Standaardtechnieken en modellen van de atoom- en molecuulfysica kennen en hanteren binnen relevante toepassingsdomeinen.
- 5 Klassieke en moderne wetenschappelijke bronnen kritisch hanteren.
- 6 Doelgericht gegevens selecteren, schematiseren en op een gestructureerde manier verwerken.
- 7 Fysische terminologie (ook in het Engels) correct hanteren.

Creditcontractvoorwaarde

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk na gunstige beoordeling van de competenties

Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

Didactische werkvormen

Demonstratie, Online discussiegroep, Online hoorcollege, Begeleide zelfstudie, Hoorcollege, Werkcollege: geleide oefeningen

Leermateriaal

Syllabus (226 p) beschikbaar op Ufora voor download, of via studentenvereniging.
Uitgewerkte oefeningen ook via Ufora.

Referenties

P.W. Atkins en R.S. Friedman, "Molecular Quantum Mechanics", vierde druk, prijs £ 35,99 (Paperback) ISBN-10: 0-19-927498-3 ; ISBN-13: 978-0-19-927498-7
Publicatiedatum : 23 december 2004 ; 608 bladzijden.

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Interactieve ondersteuning via Ufora (forums), e-mail of persoonlijk (op afspraak).

Evaluatiemomenten

periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Mondeling examen, Schriftelijk examen met open vragen

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Mondeling examen, Schriftelijk examen met open vragen

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie**Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie**

Niet van toepassing

Toelichtingen bij de evaluatievormen

Theorie: mondeling met schriftelijke voorbereiding, gesloten boek
Oefeningen: schriftelijk, open boek

Eindscoreberekening

- 5/20 punten op theorie
- 15/20 punten op oefeningen