

## Atoom- en molecuulfysica (C004222)

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

**Studiepunten 5.0** **Studietijd 150 u**

**Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2024-2025**

Semester	Taal	Locatie	Werkvorm	Uren
A (semester 2)	Nederlands	Gent	hoorcollege	25.0u
			werkcollege	10.0u
B (semester 2)	Nederlands	Gent	werkcollege	
			hoorcollege	

**Lesgevers in academiejaar 2024-2025**

Joos, Jonas	WE04	Verantwoordelijk lesgever
Vrielinck, Henk	WE04	Medelesgever

**Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2024-2025**

Opleiding	stptn	aanbodsessie
<a href="#">Bachelor of Science in de fysica en de sterrenkunde</a>	5	A
<a href="#">Educatieve Master of Science in de wetenschappen en technologie (afstudeerrichting wiskunde)</a>	6	A, B
<a href="#">Master of Science in de wiskunde</a>	6	A, B
<a href="#">Vorbereidingsprogramma tot Master of Science in de fysica en de sterrenkunde</a>	5	A
<a href="#">Vorbereidingsprogramma tot Master of Science in Physics and Astronomy</a>	5	A

**Onderwijstalen**

Nederlands

**Trefwoorden**

Kwantummodellering van elektronische en moleculaire structuur, elektronische spectroscopie, vibratoire spectroscopie.

**Situering**

Dit opleidingsonderdeel behoort tot de leerlijn Structuur van materie in de Bacheloropleiding Fysica en Sterrenkunde.

Deze cursus heeft tot doel om de principes van de kwantummechanica toe te passen op atomen en moleculen. Analytische en numerieke rekentechnieken worden toegepast om golf functies en energie-eigenwaarden voor atomen en moleculen te bepalen en hieruit vervolgens fysische observabelen te bepalen zoals moleculaire structuur in grond- en aangeslagen toestanden, elektronische en vibratoire spectra. Theoretische resultaten worden steeds afgetoetst aan experimentele observaties. Dit opleidingsonderdeel vormt de brug tussen fundamentele theoretische natuurkunde en meer toegepaste domeinen zoals fotonica, vastestoffysica en chemie.

**Inhoud**

- Waterstofatoom: herhaling analytische oplossing (eigenfuncties en energie-eigenwaarden); fijnstructuur; hyperfijnstructuur.
- Heliumatoom: grondtoestand; geëxciteerde toestanden en spectrum; Pauliprincipe.
- Polyelektronische atomen en ionen: centrale-veldbenadering; Slaterdeterminant; Hartree-Fock theorie; Schillenmodel en systematiek: kwantummechanische oorsprong van het periodiek systeem.
- Aangeslagen toestanden van atomen: perturbatieve behandeling van elektronische Coulombrepulsie en spinbaankoppeling in het Russell-Saunders- en jj-koppelingsschema; configuratie-interactie en elektroncorrelatie.
- Atomaire spectroscopie: interactie tussen materie en straling; absorptie en emissie; selectieregels; lasers; atomen in een extern elektrisch en magnetisch veld.

- Moleculaire Hamiltoniaan: Born-Oppenheimerbenadering; niet-adiabatische termen.
- Moleculaire orbitaaltheorie: symmetrieclassificatie van moleculen; lineaire combinaties van atomaire orbitalen (LCAO); Hückeltheorie voor pi-elektronen; ligandveldtheorie voor d-elektronen.
- Vibratoire spectroscopie van moleculen: normale modes, overtonen en combinatiemodes; selectieregels; infrarood- en Ramanspectra; rotatoire energieniveaus.
- Elektronische spectroscopie van moleculen: Franck-Condontransities; selectieregels, fluorescentie en fosforescentie; niet-radiatief verval.

### Begincompetenties

Niet-relativistische kwantummechanica (impulsmomentaalgebra, waterstofatoom, storingsrekening), elektromagnetisme, groepen- en representatietheorie. Dit komt overeen met de eindcompetenties van de vakken Kwantummechanica 2, Relativiteit en elektromagnetisme en Groepen en representaties.

### Eindcompetenties

- 1 Fysische kernbegrippen en basismethoden van de atoom- en molecuulfysica kennen en kunnen toepassen.
- 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 hebben en praktisch kunnen toepassen van de wiskunde, onder meer groepen- en representatietheorie, bij het oplossen van fysische problemen.
- 4 Argumenteren binnen welke grenzen fysische en wiskundige benadering correct kunnen worden gehanteerd.
- 5 Atomaire en moleculaire spectra kunnen interpreteren.
- 6 Gevorderde kennis van elektronische structuur van materie en de spectroscopie van atomen en moleculen die toelaat om geavanceerde experimentele of theoretische studies en onderzoek in dit vakgebied of aanverwante vakgebieden te starten.
- 7 Fysische terminologie correct hanteren in Nederlands en Engels.

### Creditcontractvoorwaarde

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

### Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

### Didactische werkvormen

Werkcollege, Hoorcollege

### Toelichtingen bij de didactische werkvormen

Studenten wiskunde (aanbodssessie B) krijgen een bijkomend project waarin een onderzoeksvraag opgelost dient te worden aan de hand van opzoekings- en/of numeriek werk. De student zal de resultaten mondeling toelichten.

### Studiemateriaal

Type: Syllabus

Naam: Atomic and molecular physics  
 Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding  
 Optioneel: nee  
 Taal : Engels  
 Aantal pagina's : 216  
 Beschikbaar op Ufora : Ja  
 Online beschikbaar : Nee  
 Beschikbaar in de bibliotheek : Nee  
 Beschikbaar via studentenvereniging : Ja

### Referenties

- M. Weissbluth, Atoms and Molecules, 1e druk, Academic Press 2012 (ISBN 978-0323142946), prijs €59.90; 730 bladzijden.
- P.W. Atkins en R.S. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 5e druk, Oxford 2011 (ISBN 978-0199541423), prijs €74.89; 537 bladzijden.
- B. O. Roos, R. Lindh, P. A. Malmqvist, V. Veryazov, P.-O. Widmark, Multiconfigurational Quantum Chemistry, 1<sup>e</sup> druk, Wiley 2016 (ISBN 978-0470633465), prijs €115; 240 bladzijden.
- M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, Group Theory: Application to the Physics of Condensed

Matter, Springer 2010 (ISBN 978-3642069451), prijs €53.49; 597 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**

Mondelinge evaluatie, Schriftelijke evaluatie met open vragen

### **Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode**

Mondelinge evaluatie, Schriftelijke evaluatie 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
- Studenten wiskunde (aanbodssessie B) krijgen een bijkomend project waarin een onderzoeksvraag opgelost dient te worden aan de hand van opzoekings- en/of numeriek werk. De student zal de resultaten mondeling toelichten

### **Eindscoreberekening**

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