

## Atoom- en molecuulfysica (E025010)

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

**Studiepunten 6.0** **Studietijd 180 u**

### Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2023-2024

A (semester 1) Engels Gent hoorcollege  
werkcollege

B (semester 1) Nederlands Gent

### Lesgevers in academiejaar 2023-2024

Van Speybroeck, Veronique TW17 Verantwoordelijk lesgever  
Vrielinck, Henk WE04 Medelesgever

### Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2023-2024

	stptn	aanbodsessie
<a href="#">Brugprogramma Master of Science in Engineering Physics</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Control Engineering and Automation)</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Electrical Power Engineering)</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Maritime Engineering)</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Mechanical Construction)</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Mechanical Energy Engineering)</a>	6	A
<a href="#">European Master of Science in Nuclear Fusion and Engineering Physics</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in de ingenieurswetenschappen: toegepaste natuurkunde</a>	6	B
<a href="#">Master of Science in Engineering Physics</a>	6	A
<a href="#">Master of Science in Photonics Engineering</a>	6	A

### Onderwijstalen

Engels, Nederlands

### Trefwoorden

Atomaire en moleculaire spectra, kwantum modellering van atomen en moleculen

### Situering

Dit opleidingsonderdeel heeft tot doel de kwantummechanische grondslagen aan te leren om atomaire en moleculaire spectra te interpreteren.

### Inhoud

- Waterstofatoom: Fijnstructuur en hyperfijnstructuur, spin-orbit interactie, Darwin term, selectieregels voor elektrische dipoolovergangen, hyperfijnstructuur
- Interactie van waterstofatoom met externe elektrische en magnetische velden: Stark effect, Zeeman effect, Paschen-Back effect
- Atomaire en Moleculaire Hamiltoniaan, atomaire eenheden, Born-Oppenheimer approximatie
- Atomen met twee elektronen: De Schrodinger vergelijking voor twee deeltjes systemen, He in het onafhankelijk eendeeltjesmodel (IPM), tijdsafhankelijke storingscorrectie, effectieve nucleaire lading, Hartree-Fock voor He, Electron correlatie, spin golf functies, Pauli uitsluitingsprincipe, statistiek van ononderscheidbare deeltjes, energie-niveauschema van atomen met twee elektronen
- Atomen met meerdere elektronen: Centraal veld benadering, Pauli uitsluitingsprincipe en Slaterdeterminanten, labelen van atomaire toestanden, termsymbolen, regels van Hund,

- Hartree-Fock benadering, correcties voor de central veld benadering (L-S en j-j koppeling)
- Interactie van atomen met meerdere elektronen met externe velden
  - Moleculaire Structuur, Moleculaire Spectra. Diatomische Moleculen: symmetrie-eigenschappen, Moleculaire termsymbolen. Het moleculair waterstof ion, correlatiediagrammen. Moleculair orbitaal theorie, bindings- en antibindingsorbitalen. Homonucleaire diatomische moleculen, Heteronucleaire diatomische moleculen, moleculaire waterstof binnen de LCAO benadering, heteronucleaire molecules, moleculaire symmetrie, vibratoire en rotatoire spectra.

### **Begincompetenties**

Niet-relativistische gevorderde kwantummechanica en storingsrekening (stationair en tijdsafhankelijk) Elektromagnetisme

### **Eindcompetenties**

- 1 Modelling van atomen en moleculen op basis van kwantummechanische principes en interpretatie van atomaire en moleculaire spectra.
- 2 Toepassingsgericht en kritisch reflecteren over innovatieve inzichten bekomen uit modelleren van atomen en moleculen.
- 3 Voldoende parate kennis en inzicht bezitten om resultaten van complexe berekeningen van atomen en moleculen kritisch te evalueren op hun accuraatheid.
- 4 De eigen kwantummechanische kennis creatief, doelgericht en innovatief inzetten voor het oplossen van moleculaire en atomaire veeldeeltjesproblemen.

### **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, Practicum, Zelfstandig werk

### **Toelichtingen bij de didactische werkvormen**

Hoorcolleges; Werkcolleges

De practica zijn onder de vorm van "lab lectures" over (1) het Zeeman effect, (2) hyperfijninteracties, geobserveerd met elektronen paramagnetische resonantie, en (3) moleculaire vibraties en rotaties geobserveerd met Fourier transform infraroodspectroscopie.

### **Leermateriaal**

Syllabus 2016

### **Referenties**

- B. H. Bransden & Joachain, Physics of Atoms and Molecules, ISBN 0582 35692, Second Edition published 2003
- J. M. Hollas, Modern Spectroscopy, ISBN 0-471-93076-8

### **Vakinhoudelijke studiebegeleiding**

Lesgever en assistenten zijn beschikbaar voor vragen voor en na de lessen of op afspraak.

### **Evaluatiemomenten**

periodegebonden evaluatie

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

Mondelinge evaluatie open boek, Schriftelijke evaluatie open boek

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

Mondelinge evaluatie open boek, Schriftelijke evaluatie open boek

### **Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie**

### **Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie**

Niet van toepassing

### **Toelichtingen bij de evaluatievormen**

Apart Theorie en Oefeningen examen

Theorie : mondeling examen met open boek, schriftelijke voorbereiding;

Oefeningen : schriftelijk examen met open boek

### **Eindscoreberekening**

