

## Inleiding tot de atoom- en moleculfysica (C000919)

Wegens Covid19 kan mogelijk afgeweken worden van de onderwijs- en evaluatievormen. Dergelijke afwijkingen zullen via Ufora worden gecommuniceerd.

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

**Studiepunten 6.0**                      **Studietijd 180 u**                      **Contacturen**                      52.5 u

### Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2020-2021

A (semester 1)	Nederlands	Gent	werkcollege: geleide oefeningen	17.5 u
			demonstratie	2.5 u
			online hoorcollege	15.0 u
			hoorcollege	15.0 u
			online discussiegroep	2.5 u

### Lesgevers in academiejaar 2020-2021

Smet, Philippe	WE04	Verantwoordelijk lesgever
Joos, Jonas	WE04	Medelesgever
Vrielinck, Henk	WE04	Medelesgever

### Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2020-2021

	stptn	aanbodssessie
<a href="#">Bachelor of Science in de fysica en de sterrenkunde</a>	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 moleculen 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 magneetveld, 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*, centraleldebenadering, 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 moleculen; 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 mits gunstige beoordeling van de competenties

### **Examencontractvoorwaarde**

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

### **Didactische werkvormen**

Demonstratie, hoorcollege, online discussiegroep, werkcollege: geleide oefeningen, online hoorcollege

### **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) IBSN-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**

Schriftelijk examen met open vragen, openboekexamen, mondeling examen

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

Schriftelijk examen met open vragen, openboekexamen, mondeling examen

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

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

Niet van toepassing

### **Toelichtingen bij de evaluatievormen**

Open boek examen  
Theorie : mondeling  
Oefeningen : schriftelijk

### Eindscoreberekening

5/20 punten op theorie

15/20 punten op oefeningen (3 oefeningen)