

1. De grondtoestand van Silicium, $Z = 14$.

- Geef de electronenconfiguratie voor de grondtoestand. Deze configuratie geeft aanleiding tot 3 termen: 1S , 1D , 3P .
- Welke fysische interactie is verantwoordelijk voor het energieverval tussen deze termen?
- Geef de ontardingsgraad van elk van de termen.
- Geef aan welke interactie deze ontardingen opheft dan wel kan opheffen.

De toestandsfunctie voor één van de niveaus van de 1D term kunnen wij als volgt weergeven:

$|^1D;1,0\rangle$, waarin naast het termsymbool respectievelijk de quantumgetallen M_L en M_S worden gespecificeerd.

- Leid de uitdrukking af voor de $|^1D;1,0\rangle$ functie in termen van Slater-determinanten.
- Schrijf de $|^1D;1,0\rangle$ functie als een product van de baanfunctie en de spinfunctie van de valentie-electronen en laat zien dat deze beschrijving equivalent is aan die in termen van Slater-determinanten.

2. Beschouw de elementen magnesium ($Z=12$) en ijzer ($Z=26$). De niveaus van de $(3s)(3p)$ configuratie van Mg en van het Fe^{14+} ion hebben ten opzichte van de grondtoestand de volgende energieën:

Mg: 21850 cm^{-1} , 21870 cm^{-1} , 21911 cm^{-1} en 35051 cm^{-1}

Fe^{14+} : 233860 cm^{-1} , 239660 cm^{-1} , 253780 cm^{-1} en 351930 cm^{-1}

- Geef de quantumgetallen die de niveaus karakteriseren in het LS-koppelingsschema.
- Bereken de spinbaankoppelingsconstante in de $(3s)(3p)$ configuratie van Mg.
- Schat uit bovengenoemde energieën af of de spinbaankoppeling in de $(3s)(3p)$ configuratie voor Fe^{14+} groter of kleiner is dan voor Mg. Licht toe of uw antwoord ook te verwachten was.
- In het spectrum van de zon vinden wij een sterke lijn bij $41,726\text{ nm}$ die afkomstig is van Fe^{14+} . Leg uit met welke overgang deze lijn correspondeert. Verwacht u dat de overeenkomstige overgang ook waarneembaar is voor Mg? Licht uw antwoord kort toe.

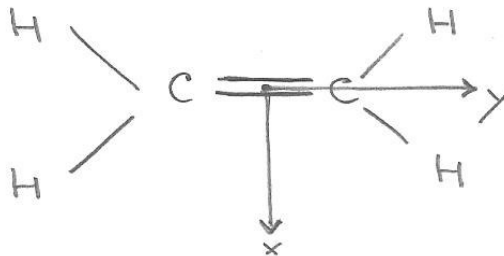
3. De grondtoestand van Si^{3+} heeft één $3s$ valentie-elektron. De aangeslagen $3p$ configuratie bestaat uit twee niveaus op een onderlinge afstand van 460 cm^{-1} . Wij plaatsen het silicium ion in een magneetveld ter grootte van 1 mT . Het Bohr magneton heeft een waarde van ongeveer $0,5\text{ cm}^{-1}/T$.

Laat zien hoe de $^2P_{\frac{1}{2}} \rightarrow ^2S_{\frac{1}{2}}$ emissielijn van Si^{3+} opsplijt in dit magneetveld.

4. De werking van de waterstofmaser berust op door gestimuleerde emissie geïnduceerde overgangen tussen twee hyperfijn niveaus van het waterstofatoom.
- a. Welke fysische interactie veroorzaakt de opsplitsing van een niveau in hyperfijn niveaus? Wat zijn de goede quantumgetallen?

Een belangrijk onderdeel van de waterstofmaser is de 'magnetic state selector'. Hierin wordt een inkomende bundel waterstofatomen gesplitst in bundels atomen die in verschillende (hyperfijn)toestanden zitten. Door middel van een kleine opening wordt één van deze bundels geselecteerd en in de maserbuis gekoppeld.

- b. Het opsplitsen van de bundel atomen vindt plaats onder invloed van een (sterk) inhomogeen magneetveld. Beschrijf kort maar nauwkeurig hoe dit werkt en geef daarbij duidelijk de onderliggende fysische principes aan.
- c. Leg kort uit waarom het selecteren van de atomen die in een specifieke hyperfijn toestand zitten, essentieel is voor de werking van de waterstofmaser.
5. De koolstof-koolstofbinding in het vlakke molecuul etheen, C_2H_4 .



Voor de beschrijving van de elektronische toestandsfuncties van moleculen maken wij gebruik van moleculaire orbitalen als lineaire combinatie van atomaire orbitalen (LCAO-MO).

De electronenconfiguratie van koolstof is $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$.

Voor de atomaire $2p$ orbitals nemen wij de orbitals $2p_x$, $2p_y$ en $2p_z$ [lineaire combinaties van de atomaire $2p_1$ ($n=2, l=1, m=1$), $2p_0$ en $2p_{-1}$], die transformeren als x , y en z onder rotatie (d.w.z. het hoekafhankelijk deel wordt gegeven door x , y en z).

- a. Construeer, op basis van geometrische overwegingen, 3 orthonormale AO's als lineaire combinaties van $2s$, $2p_x$ en $2p_y$ (zogenaamde sp^2 hybride AO's) op een koolstofatoom van etheen onder de aanname dat alle bindingen hoeken van 120° maken.
- b. Schets de electrondichtheidsverdeling corresponderende met de sp^2 hybride AO's.
- c. Bekijk nu de koolstof-koolstofbinding en beschrijf deze binding in het LCAO-MO schema. Hybride atomic orbitals geven aanleiding tot de σ binding (cylindersymmetrisch om de koolstof-koolstofas) en de overblijvende $2p$ orbitals tot de π binding. Is de π binding sterker of zwakker dan de σ binding? Licht uw antwoord kort toe.