

Oefenopgaven Moleculaire Quantummechanica, Hoofdstuk 4, 20 April
2009

Vraagstuk 1: Tensoren

Gegeven zijn de tweede-rangs tensoren \overleftrightarrow{A} en \overleftrightarrow{B} , met componenten \mathbf{A} en \mathbf{B} (reële 3×3 matrices). De componenten van \overleftrightarrow{A} transformeren volgens de definitie van een tweede-rangs tensor als

$$\mathbf{A} = \mathbf{R}\mathbf{A}'\mathbf{R}^T.$$

1a. Leg uit wat \mathbf{R} en \mathbf{A}' zijn in deze definiërende vergelijking.

1b. Gegeven is de grootheid C , waarvan de componenten ten opzichte van een basis gegeven zijn door $\mathbf{C} = \mathbf{A} + \mathbf{B}$. Is de grootheid C een tensor? Licht je antwoord toe.

Gegeven is de grootheid D met één component, gegeven door

$$d = \text{Sp}(\mathbf{A}^T \mathbf{B}),$$

waarbij Sp staat voor “spoor”, de som van de diagonaalelementen.

1c. Laat zien dat voor willekeurige (vierkante) matrices \mathbf{X} en \mathbf{Y} geldt dat

$$\text{Sp}(\mathbf{X}\mathbf{Y}) = \text{Sp}(\mathbf{Y}\mathbf{X}).$$

1d. Laat zien dat D een tensor is. Wat is de rang van D ?

Vraagstuk 2: Lading-dipool interactie

Gegeven is een twee-atomig molecuul AB, met een bindings afstand r . De binding wordt beschreven als een ion binding, waarbij atoom A een lading heeft gelijk aan $-\delta$, en atoom B een lading δ . Het molecuul AB ligt op de z -as, atoom A heeft als z -coördinaat $-r/2$, en atoom B heeft als z -coördinaat $+r/2$. Verder is gegeven een ion C, met een lading Q , op de positieve z -as op een afstand R van de oorsprong. We veronderstellen dat $R > r$.

2a. Geef de formule voor de Coulomb interactie (in atomic units) tussen het molecuul en het ion.

2b. Schrijf deze Coulomb interactie als een reeksontwikkeling in machten van $(1/R)$. Hint:

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{i=0}^{\infty} x^i, \text{ voor } |x| < 1.$$

2c. Geef een fysische interpretatie van de eerste twee termen in de reeks.

2d. Schrijf $(1-x)^{-1}$ als som van machten van x voor $|x| > 1$. Gebruik de hint uit onderdeel b.

Vraagstuk 3: Tweede orde storingsrekening

De uitdrukking voor de tweede-order interactie energie tussen twee moleculen is

$$V_2 = \sum'_{a,b} \frac{\langle \phi_0 \chi_0 | V_{AB} | \phi_a \chi_b \rangle \langle \phi_a \chi_b | V_{AB} | \phi_0 \chi_0 \rangle}{E_0^A + E_0^B - E_a^A - E_b^B}$$

3a. Definieer alle symbolen in de gegeven formule.

3b. Splits de som $\sum_{a,b}$ in drie termen en geef van iedere term de fysische interpretatie.