

Vraag 1:

- Beschrijf hoe je een DFT berekening voor het bepalen van de structuur van fosgeen (COCl_2) uitvoert met het ADF programma. Noem vooral de verschillende conceptuele stappen en keuzes die worden uitgevoerd.
- Hoe wordt het infrarood (IR) spectrum van fosgeen berekend uit de ladingsdichtheid die verkregen is met deze DFT berekening? Geef de stappen om de frekwentie en de intensiteit van het IR spectrum te berekenen. (formules zijn niet nodig).
- Hoe wordt het röntgenabsorptiespectrum van fosgeen berekend?
- Wat is het LS termsymbool van de grondtoestand van een vanadium-atoom met een $[\text{Ar}]4s^2 3d^3$ configuratie.
- Een zuurstof atoom heeft een $1s^2 2s^2 2p^4$ configuratie. Maak een tekening van de moleculaire orbitalen van een zuurstof molecuul (O_2). Verklaar de tekening.
- Wat is het LS termsymbool van de grondtoestand van het zuurstof molecuul?

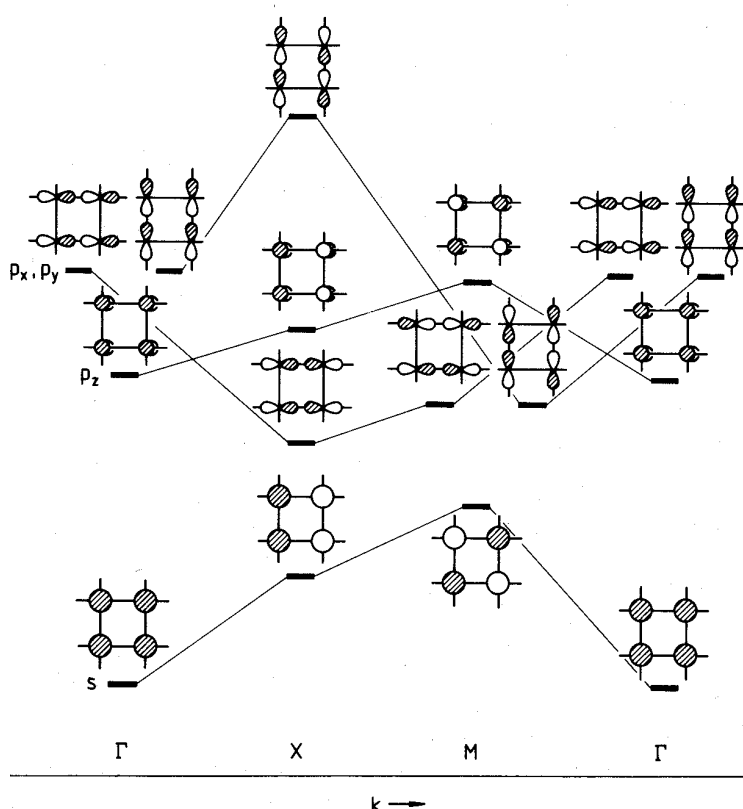
Vraag 2:

De tekening hieronder geeft de s en p orbitalen van 4 atomen uit een oneindig tweedimensionaal vlak van atomen, liggende in het xy-vlak.

Een gearceerd deel van een orbitaal heeft een positief teken en een leeg deel van een orbitaal heeft een negatief teken.

Γ , X en M geven bepaalde punten in de Brillouin zone. Bij Γ zijn alle orbitalen op alle atomen gelijk; bij X worden de orbitalen bij iedere even rij op de x-as gespiegeld zodat de negatieve delen van de orbitaal positief worden; bij M worden zowel de even rij op de x-as als de y-as gespiegeld.

- Verklaar de relatieve energie-niveaus van de s orbitalen.
- Verklaar de relatieve energie-niveaus van de p_x , p_y en p_z orbitalen.



Vraag 3

- a. De ruimte-spin orbitalen ψ_a en ψ_b zijn allebei eigenfuncties van een 1-elektron Hamiltoniaan $\hat{h}$. Wat is de waarde van de integraal in Vergl. 1, en waarom?

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_a^*(\mathbf{x}) \psi_b(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (1)$$

- b. Wat zijn de drie belangrijkste benaderingen bij het kwantum mechanisch berekenen van de energie van moleculen met Hückel, Hartree, of Hartree-Fock?
- c. Beschrijf de verschillende termen in de Hamiltoniaan in Vergl. (2). In welke methode wordt deze Hamiltoniaan gebruikt?

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_A \frac{Z_A}{r_{iA}} + \frac{r(r)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} \quad (2)$$

- d. Je bent geïnteresseerd in een systeem van 3 elektronen in doublet spin toestand (bezette ruimtelijke orbitalen zijn 2 x ϕ_a , en 1 x ϕ_b). Wat is de determinant-notatie van de Slater determinant die dit systeem beschrijft? (Note: Je hoeft niet alle termen uit te schrijven).
- e. Als je voor dit systeem de 1-electron term van de Hartree-Fock energy (Vergl. 3) helemaal zou uitschrijven, om hoeveel termen zou het dan gaan?

$$\langle Y | \hat{h} | Y \rangle \quad (3)$$

Note: Om deze vraag te beantwoorden hoeft je niet alle termen uit te schrijven.

- f. Hoeveel termen zullen er overblijven als je alle termen die gelijk zijn aan nul wegstreept?
- g. Geef een voorbeeld van een term uit vraag f) die overblijft, en een term die wegvalt (gelijk is aan nul).

Vraag 4

- a. Wat is electron correlatie?
- b. Hohenberg-Kohn theorema I vertelt ons dat twee verschillende moleculen (A en B) niet dezelfde elektronendichtheid kunnen hebben. Wat voor systeem kan wel dezelfde elektronendichtheid hebben als molecuul A?
- c. Een LDA energie berekening aan een proton in de buurt van een chloor ion resulteert in een elektronendistributie die overeenkomt met twee neutrale atomen, in plaats van twee ionen. Welk probleem van DFT veroorzaakt deze fout?
- d. Wat kun je (in woorden) vertellen over de DFT functionaal PBE?