

Elektronische structuur (C003972)

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

Studiepunten 5.0 **Studietijd 135 u**

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2023-2024

A (semester 1)	Nederlands	Gent	hoorcollege werkcollege
----------------	------------	------	----------------------------

Lesgevers in academiejaar 2023-2024

Bultinck, Patrick	WE06	Verantwoordelijk lesgever
Acke, Guillaume	WE06	Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2023-2024

	stptn	aanbodsessie
Bachelor of Science in de chemie	5	A
Schakelprogramma tot Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Materials and Nano Chemistry)	5	A
Vorbereidingsprogramma tot Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Materials and Nano Chemistry)	5	A

Onderwijstalen

Nederlands

Trefwoorden

Kwantumchemie, kwantummechanica, theoretische chemie

Situering

Het opleidingsonderdeel 'Elektronische Structuurmethodes' is een vak binnen de leerlijn fysische chemie. Het beoogt een grondige kennis van methoden voor het benaderend oplossen van niet exact oplosbare problemen in de kwantummechanica van atomen en moleculen en een introductie tot elektroncorrelatie. De nadruk ligt hierbij op het fundamentele inzicht in de theorie en toepassing van elektronische structuurmethoden voor atomen en moleculen met behulp van enkele Slater determinant methoden die tot in detail worden uitgewerkt. Het opleidingsonderdeel maakt gebruik van vaardigheden in modelleren en simuleren.

Inhoud

- Benaderingsmethoden voor niet exact oplosbare problemen
- Meer-elektron atomen: de centrale veld benadering
- Koppeling van angulaire momenta
- Meer-elektron atomen: geavanceerde benaderingen
- Matrixrepresentaties van operatoren en Clebsch-Gordan koppeling
- Moleculen: De Born-Oppenheimerbenadering
- Diatomische moleculen: quantumgetallen en golffuncties
- Single Slater determinant methoden: Hartree-Fock theorie
- Meerdere Slater determinant methoden: Configuratie-Interactie

Begincompetenties

Dit opleidingsonderdeel bouwt verder op bepaalde eindcompetenties van de opleidingsonderdelen:

- Algemene chemie
- Chemische structuren
- Wiskunde: basisconcepten
- Wiskunde: gevorderde technieken
- Fysica: mechanica
- Fysica: golven, optica en thermodynamica

Dit opleidingsonderdeel bouwt sterk voort op de kennis en vaardigheden verworven in Chemische Structuren (C003964) en de wiskundevakken (C004113 en C004114). Het is essentieel dat de student deze vakken doorlopen heeft vooraleer Elektronische Structuur te volgen.

Eindcompetenties

- 1 De student heeft inzicht in de fundamentele aspecten van de kwantummechanische theorieën zoals gebruikt bij niet exact oplosbare problemen.
- 2 De student begrijpt de kracht en beperkingen van de methodes voor de bepaling van de elektronisch structuur.
- 3 De student kan voor relatief eenvoudige systemen de elektronische structuur modellen ontwerpen en de oplossingen daarvan interpreteren.

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

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

Omwille van COVID19 kunnen gewijzigde werkvormen uitgerold worden indien dit noodzakelijk blijkt.

Leermateriaal

Een geïntegreerde Engelstalig cursuspakket wordt te koop aangeboden, aangevuld met opgaves van werkcolleges, weblectures en kennisclips. Elke student moet over een eigen computer met webcam en microfoon beschikken.

Referenties

- "Molecular Quantum Mechanics, 5th edition", P. W. Atkins en R. S. Friedman (Oxford University Press), ISBN: 978-0199541423
- "Quantum Chemistry, 2nd edition", D. A. McQuarrie (University Science Books), ISBN: 978-1891389504
- "Introduction to quantum mechanics, 2nd edition", B.H. Bransden en C.J. Joachain (Longman Scientific), ISBN: 978-0582356917

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Interactieve ondersteuning via Ufora 'Discussies'. Individuele uitleg door lesgevers/assistenten: op elektronische afspraak via MS Teams.

Evaluatiemomenten

periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Mondelinge evaluatie, Schriftelijke evaluatie met open vragen

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Mondelinge evaluatie, Schriftelijke evaluatie met open vragen

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Niet van toepassing

Toelichtingen bij de evaluatievormen

De evaluatie gaat zowel over de hoorcolleges (mondeling examen met schriftelijke voorbereiding) als over de werkcolleges (schriftelijk examen, open boek). Het examen toetst (1) het inzicht in de elektronische structuurmethodes, (2) het vermogen om die toe te passen op chemische problemen en (3) resultaten bekomen met die methodes te interpreteren.

Eindscoreberekening

Het examen bestaat uit twee luiken: het theorieluik (waarvan één onderdeel mondeling met schriftelijke voorbereiding en één onderdeel louter schriftelijk) beoordeeld voor 10 van de 20 punten en het oefeningenluik (waarvan het enige onderdeel louter schriftelijk is) dat tevens voor 10 van de 20 punten telt. Studenten moeten aan alle onderdelen van het examen deelnemen om te kunnen slagen voor het examen. Wanneer men niet deelneemt aan de

evaluatie van één of meer onderdelen of minder dan 4/10 heeft voor één van de luiken, kan men niet meer slagen voor het geheel van het opleidingsonderdeel. Indien de eindscore toch een cijfer van tien of meer op twintig zou zijn, wordt dit teruggebracht naar een niet-delibereerbaar cijfer.