

## Elektronische structuur (C003972)

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

**Studiepunten 5.0** **Studietijd 135 u**

**Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2024-2025**

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

**Lesgevers in academiejaar 2024-2025**

Bultinck, Patrick	WE06	Verantwoordelijk lesgever
Acke, Guillaume	WE06	Medelesgever

**Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2024-2025**

	stptn	aanbodsessie
<a href="#">Bachelor of Science in de chemie</a>	5	A
<a href="#">Schakelprogramma tot Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Materials and Nano Chemistry)</a>	5	A
<a href="#">Vorbereidingsprogramma tot Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Materials and Nano Chemistry)</a>	5	A

**Onderwijstalen**

Nederlands

**Trefwoorden**

Kwantumchemie, kwantummechanica, theoretische chemie

**Situering**

Het opleidingsonderdeel 'Elektronische Structuurmethoden' 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 golf functies
- 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

### **Studiemateriaal**

Type: Syllabus

Naam: Bachelor's quantum theory

Richtprijs: € 20

Optioneel: nee

Taal : Engels

Aantal pagina's : 200

Beschikbaar op Ufora : Ja

Online beschikbaar : Ja

Beschikbaar in de bibliotheek : Nee

Beschikbaar via studentenvereniging : Nee

### **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 'Discussions'. 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.