

## Symmetrie en spectroscopie (C003973)

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

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

**Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2023-2024**

A (semester 2)	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
<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**

symmetrie, groepentheorie, chemische binding, spectroscopie

**Situering**

Dit opleidingsonderdeel kadert binnen de leerlijn fysische chemie en heeft als doel de studenten vertrouwd te maken met groepentheoretische methoden en de toepassingen hiervan voor elektronische toestanden en spectroscopische eigenschappen van atomen en moleculen. Het opleidingsonderdeel maakt gebruik van vaardigheden in modelleren en simuleren.

**Inhoud**

- Groepentheorie en symmetrie: Symmetrie-elementen en operaties, Groepentheoretische benadering van symmetrie, Voorstellingen en hun reductie tot niet-reduceerbare voorstellingen, Het groot orthogonaliteitstheorema en projectieoperatoren, Symmetrie-aangepaste lineaire combinaties.
- Symmetrie en moleculair orbitaaltheorie: Hückel theory, Ligandveldtheorie, Jahn-Teller effect.
- Symmetrie en vibratiespectroscopie: Spectroscopische transitities, Vibratoire energieniveaus van diatomaire molecules, Vibratoire selectieregels, Vibraties van polyatomaire molecules.
- Symmetrie en elektronische transitities: Elektronische selectieregels, Frank-Condon principe, Vibronische transitities.

**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

Studenten dienen voorafgaand aan het volgen van deze cursus de cursus Elektronische Structuur (C003972) gevolgd te hebben in hetzelfde academiejaar of vroeger.

## **Eindcompetenties**

- 1 De student heeft inzicht in de fundamentele aspecten van de groepentheorie.
- 2 De student begrijpt de kracht en beperkingen van deze methoden.
- 3 De student begrijpt het belang van symmetrie voor het opstellen van kwalitatief correcte MO diagrammen.
- 4 De student begrijpt het verband tussen symmetrie en spectroscopische selectieregels.

## **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**

On campus hoorcollege, online werkcollege: geleide oefeningen met ondersteuning via Ufora en MS Teams. Omwille van COVID19 kunnen gewijzigde werkvormen uitgerold worden indien dit noodzakelijk blijkt.

## **Leermateriaal**

Een geïntegreerde cursus wordt te koop aangeboden. Opgaves van werkcolleges worden aangevuld met weblectures en kennisclips. Elke student dient over een eigen computer met webcam en microfoon te beschikken.

## **Referenties**

- "Group Theory Applied to Chemistry", A. J. Ceulemans (Springer), ISBN: 978-9402406139
- "Symmetry: An Introduction to Group Theory and Its Applications", R. McWeeny (Dover Publications), ISBN: 978-0486421827
- "Group Theory and Chemistry", D. M. Bishop (Dover Publications), ISBN: 978-0486673554

## **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**

Het examen bestaat uit aan het theorieluik, waarvan één onderdeel mondeling met schriftelijke voorbereiding en één onderdeel louter schriftelijk, en een oefeningenluik, waarvan het enige onderdeel louter schriftelijk is.

## **Eindscoreberekening**

Zowel het theorieluik als het oefeningenluik worden respectievelijk beoordeeld voor tien van de twintig punten. Studenten die niet deelnemen aan de evaluatie van één of meer onderdelen of minder dan vier op tien halen voor één van de luiken, kunnen niet meer slagen voor het geheel van het opleidingsonderdeel. Indien in dat geval de eindscore toch een cijfer van tien of meer op twintig zou zijn, wordt dit teruggebracht naar een niet-delibereerbaar cijfer.