

Symmetrie en spectroscopie (C003973)

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

Studiepunten 5.0 **Studietijd 135 u**

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2024-2025

A (semester 2)	Nederlands	Gent	werkcollege hoorcollege
----------------	------------	------	----------------------------

Lesgevers in academiejaar 2024-2025

Bultinck, Patrick	WE06	Verantwoordelijk lesgever
Acke, Guillaume	WE06	Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2024-2025

	stptn	aanbodssessie
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

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.

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

- "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 '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

Het examen bestaat uit aan het theoretisch, 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 theoretisch 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.

