

Advanced Quantum Chemistry (C004147)

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

Studiepunten 4.0 **Studietijd 115 u**

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2026-2027

A (semester 2) Engels Gent zelfstandig werk
hoorcollege

Lesgevers in academiejaar 2026-2027

Bultinck, Patrick WE06 Verantwoordelijk lesgever
Acke, Guillaume WE06 Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2026-2027

	stptn	aanbodsessie
Educatieve Master of Science in de wetenschappen en technologie (afstudeerrichting chemie)	4	A
Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Materials and Nano Chemistry)	4	A
Uitwisselingsprogramma chemie (niveau master)	4	A

Onderwijstalen

Engels

Trefwoorden

elektronische structuur, elektroncorrelatie, ab initio methodes

Situering

Deze cursus bouwt voort op een grondige inleiding tot de moleculaire kwantummechanica en heeft tot doel de studenten vertrouwd te maken met moderne methoden voor elektronische structuurberekeningen gebaseerd op golf functies. Deze cursus biedt de noodzakelijke theoretische achtergrond voor de cursus 'Computational Quantum Chemistry'.

Inhoud

- Kwantumchemische bouwstenen: Basissets, Integralen, Spin
- Hartree-Fock-theorie: Zelfconsistent veld, Roothaan-Hall, Pople-Nesbett
- Tweede kwantisatie: Algebra van creatie- en annihilatieoperatoren, Wicks theorema, Kutzelnigg-Mukherjee en diagrammatische notatie
- Moderne methoden voor elektronische structuurberekeningen: Configuratie-interactie, Coupled Cluster, Multiconfiguratie zelfconsistent veld, Veellichaamsstoringstheorie
- Resonstheorie: Moleculaire eigenschappen, Orbitaalrelaxatie

Begincompetenties

Deze cursus bouwt verder op bepaalde eindcompetenties van de cursussen:

- Wiskunde: basisconcepten
- Elektronische structuur
- Symmetrie en spectroscopie

Eindcompetenties

- 1 De bouwstenen van nieuwe elektronische structuurmethodes kritisch toelichten.
- 2 Nieuwe methodologieën uitwerken met tweede gekwantiseerde argumenten.
- 3 De toepasbaarheid van nieuwe elektronische structuurmethodes beargumenteren.

Creditcontractvoorwaarde

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk na gunstige beoordeling van de competenties

Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

Didactische werkvormen

Hoorcollege, Zelfstandig werk

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

De studenten krijgen gedurende de hoorcolleges de basisingrediënten van kantumchemische methoden aangereikt en vullen deze kennis verder aan via begeleide zelfstudie en flipped classroom.

Studiemateriaal

Type: Andere

Naam: Lesmateriaal'

Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding

Optioneel: nee

Bijkomende info: An integrated course is offered via Ufora, where course notes and assignments from tutorials are supplemented with web lectures and knowledge clips. Each student must have their own computer with a webcam and microphone.

Referenties

- "Molecular Electronic-structure theory", T. Helgaker, P. Jorgensen, J. Olsen (Wiley), ISBN: 978-1118531471
- "Many-Body Methods in Chemistry and Physics: MBPT and Coupled-Cluster Theory", I. Shavitt, R. J. Bartlett (Cambridge University Press), ISBN: 978-0521818322
- "Second Quantized Approach to Quantum Chemistry: An Elementary Introduction", P. R. Surjan (Springer Berlin Heidelberg), ISBN: 978-3642747571
- "Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory", A. Szabo, N. S. Ostlund (Dover Publications), ISBN: 978-0486691862

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

College op de campus, zelfstandig werk met ondersteuning via Ufora en MS Teams.

Evaluatiemomenten

niet-periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Werkstuk

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Examen in de tweede examenperiode is enkel mogelijk in gewijzigde vorm

Toelichtingen bij de evaluatievormen

De studenten schrijven een verslag waarin ze een gepubliceerde methode kritisch benaderen door middel van een theoretische analyse die gedetailleerd genoeg is om een implementatie van die methode te starten.

Eindscoreberekening

Werkstuk: 100%