

Advanced Quantum Chemistry (C004147)

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

Studiepunten 4.0 **Studietijd 115 u**

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2024-2025

A (semester 2) Engels Gent zelfstandig werk
hoorcollege

Lesgevers in academiejaar 2024-2025

Bultinck, Patrick WE06 Verantwoordelijk lesgever
Acke, Guillaume WE06 Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2024-2025

	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

electronic structure theory, electron correlation, ab initio methods

Situering

This course follows up on a thorough introduction to molecular quantum mechanics and aims to familiarize the students with modern electronic structure methods based on wave functions. This course provides the necessary theoretical background for the course 'Computational Quantum Chemistry'.

Inhoud

- Quantum chemical building blocks: Basis sets, Integrals, Spin
- Hartree-Fock theory: Self-consistent field, Roothaan-Hall, Pople-Nesbitt
- Second quantization: Algebra of creation and annihilation operators, Wick's theorem, Kutzelnigg-Mukherjee and diagrammatic notation
- Modern electronic structure methods: Configuration interaction, Coupled cluster, Multiconfiguration self-consistent field, Many body perturbation theory
- Response theory: Molecular properties, Orbital relaxation

Begincompetenties

This course builds further on certain final competences of the courses:

- Mathematics: basic concepts
- Electronic structure
- Symmetry and spectroscopy

Eindcompetenties

- 1 Being able to judge the quality of published computational studies.
- 2 Being able to select the proper methods for a problem at hand.
- 3 Being able to develop new methods independently.

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

Hoorcollege, Zelfstandig werk

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

De studenten krijgen gedurende de hoorcolleges de basisingedriënten van quantumchemische 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

On campus lecture, independent work with support through Ufora and 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

The students write a report in which they critically approach a published method by means of a theoretical analysis that is detailed enough to start an implementation of that method.

Eindscoreberekening

Werkstuk: 100%