

## Computational Quantum Chemistry (C004148)

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

**Studiepunten 8.0** **Studietijd 210 u**

**Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2026-2027**

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

**Lesgevers in academiejaar 2026-2027**

Bultinck, Patrick	WE06	Verantwoordelijk lesgever
Acke, Guillaume	WE06	Medelesgever

**Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2026-2027**

	stptn	aanbodsessie
<a href="#">Educatieve Master of Science in de wetenschappen en technologie (afstudeerrichting chemie)</a>	8	A
<a href="#">Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Materials and Nano Chemistry)</a>	8	A

**Onderwijstalen**

Engels

**Trefwoorden**

kwantumchemische programmeren, softwareontwikkeling, methodeontwikkeling

**Situering**

Deze cursus bouwt voort op een grondige inleiding tot de moleculaire kwantummechanica en heeft als doel studenten vertrouwd te maken met de implementatie van kwantumchemische methoden, die theoretisch worden uitgewerkt in de cursus 'Advanced Quantum Chemistry'. De nadruk in deze cursus ligt op de ontwikkeling van methoden en niet op moleculaire modellering.

**Inhoud**

- Moderne softwareontwikkeling: Lineaire algebraïsche softwarepakketten, samenwerkingstools, versiebeheer, testen en code coverage, continue integratie, documentatie, systeemopbouw, softwareontwerp.
- Kwantumchemische integralen: Obara-Saika, Libint.
- Hartree-Fock: RHF, UHF, DIIS.
- Storingstheorie op Hartree-Fock: MP2.
- Gecorrigeerde kwantumchemische methoden: CEPAO, CCD, CCSD, CIS, CISD, FCI.
- Resonstheorie: CPHF, TDHF, CCLR.
- Orbitaaloptimalisatie.

**Begincompetenties**

Een uitstekende basis in de kwantumchemie is vereist, met ten minste 12 ECTS-credits aan voorkennis op het gebied van kwantumchemie, kwantummechanica en aanverwante vakgebieden. De cursus "Advanced Quantum Chemistry" is essentieel en wordt sterk aanbevolen om naast deze cursus te volgen.

**Eindcompetenties**

- 1 Benadert de ontwikkeling van moderne kwantumchemische methoden kritisch.
- 2 Ontwikkel een efficiënte implementatie op basis van de modelbeschrijving van een theoretische methode.
- 3 Voer grootschalige computerexperimenten uit op moderne, geavanceerde computerinfrastructuren.
- 4 Op een verantwoorde wijze digitale technologieën, waaronder generatieve AI,

inzetten bij het ontwikkelen van kwantumchemische methoden.

### **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**

Werkcollege, Hoorcollege

### **Toelichtingen bij de didactische werkvormen**

College op de campus, online project en online tutorials met ondersteuning via Ufora en MS Teams.

### **Studiemateriaal**

Type: Handouts

Naam: Advanced Quantum Chemistry Handout

Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding

Optioneel: nee

Taal : Engels

Aantal pagina's : 200

Beschikbaar op Ufora : Ja

Online beschikbaar : Ja

Beschikbaar in de bibliotheek : Nee

Beschikbaar via studentenvereniging : Nee

Gebruik en levensduur binnen het opleidingsonderdeel : eenmalig

Gebruik en levensduur binnen de opleiding : eenmalig

Gebruik en levensduur na de opleiding : niet

### **Referenties**

- "Molecular Electronic-structure theory" T. Helgaker, P. Jorgensen & J. Olsen, Wiley, ISBN 0-471-96755-6

### **Vakinhoudelijke studiebegeleiding**

Interactieve ondersteuning via Ufora 'Discussies'. Individuele begeleiding door docenten/assistenten: op afspraak via MS Teams.

### **Evaluatiemomenten**

niet-periodegebonden evaluatie

### **Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode**

Mondelinge evaluatie

### **Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode**

Mondelinge evaluatie

### **Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie**

Werkstuk

### **Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie**

Niet van toepassing

### **Toelichtingen bij de evaluatievormen**

- 1 De studenten ontwikkelen geleidelijk hun eigen code door eerst methoden van toenemende complexiteit te implementeren. Elke implementatie wordt afzonderlijk beoordeeld en gebruikt als onderdeel van de niet-periodieke evaluatie.
- 2 Het eindexamen bestaat uit de onafhankelijke implementatie van een kwantumchemische methode op een zeer geavanceerde computerinfrastructuur, waarbij de nadruk ligt op de efficiëntie van het programma dat is geschreven in een moderne programmeertaal. Na de evaluatie van het algoritme wordt de student tijdens een mondeling examen geïnterviewd over de methode en de implementatie ervan.

### **Eindscoreberekening**

85% van de eindscore is gebaseerd op de niet-periodieke evaluatie. 25% is gebaseerd op de evaluatie van de rapporten over de implementatie van methoden tijdens de seminars. 60% is gebaseerd op de evaluatie van de uiteindelijke en

onafhankelijke implementatie van een methode op een geavanceerde computerinfrastructuur, met de nadruk op de efficiëntie van het programma dat is geschreven in een moderne programmeertaal.

Het niet tijdig indienen van de rapporten resulteert in een score van nul voor elk rapport.

De resterende 15% van de score wordt behaald op basis van het mondeling examen over de geïmplementeerde methode en de implementatie ervan.