

Moleculaire structuur (E021560)

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

Studiepunten 3.0

Studietijd 90 u

Aanbodsessies in academiejaar 2025-2026

A (semester 2)

Nederlands

Gent

Lesgevers in academiejaar 2025-2026

Van Speybroeck, Veronique

TW17

Verantwoordelijk lesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2025-2026

[Bachelor of Science in de ingenieurswetenschappen \(afstudeerrichting biomedische ingenieurstechnieken\)](#)

stptn 3

aanbodsessie A

[Bachelor of Science in de ingenieurswetenschappen \(afstudeerrichting chemische technologie en materiaalkunde\)](#)

3

A

[Brugprogramma Master of Science in Chemical Engineering](#)

3

A

Onderwijstalen

Nederlands

Trefwoorden

Kwantummechanica, Moleculaire symmetrie, Spectroscopie

Situering

Dit vak is een verdiepende basiscursus en biedt inzicht in verschijnselen op de atomaire en moleculaire schaal.

De principes van de kwantummechanica worden geïntroduceerd met invoering van de golf functie, Schrödingervergelijking en postulaten van de kwantummechanica. Vervolgens worden deze concepten toegepast op atomaire en moleculaire systemen, teneinde de orbitalen van het waterstofatoom te bekomen en vibrationele en rotationele spectra van eenvoudige moleculen te verklaren. Het belang van symmetrie voor bekomen van spectroscopische grootheden en chemische binding worden aangeleerd.

Inhoud

- Deeltje-golf dualiteit; onbepaaldheidsprincipe van Heisenberg
- Schrödingervergelijking: dynamische en stationaire golfvergelijking; begrip golf functie en waarschijnlijkheidsdichtheid
- Postulaten van de kwantummechanica
- Toepassingen van 1-dimensionale potentiaalproblemen: oneindige potentiaalput, harmonische oscillator
- 3-dimensionale centrale potentiaal: orbitaal draaimoment, sferische harmonieken
- Waterstofatoom: energiespectrum en golf functies
- Symmetriegroepen in moleculen en spectroscopie; invoeren van puntgroepen om de symmetrie te classificeren
- Rotationele en vibrationele spectra verklaren a.d.h. harmonische oscillator en starre rotor en belang van symmetrie
- Belang van symmetrie voor het vormen van de chemische binding

Begincompetenties

Dit opleidingsonderdeel bouwt verder op bepaalde eindcompetenties van Natuurkunde I en Natuurkunde II.

Eindcompetenties

- 1 Noodzaak van een kwantummechanische beschrijving om fenomenen op de atomaire en moleculaire schaal begrijpen.
- 2 Basisbegrippen en -concepten van de kwantummechanica: dualiteit deeltje-golf; Schrödingervergelijking; waarschijnlijkheidsdistributie, postulaten van de kwantummechanica beheersen.
- 3 Oplossen van de Schrödingervergelijking voor eenvoudige potentialen (ééndimensionaal, centrale driedimensionale problemen of problemen waarbij scheiding van veranderlijken mogelijk is).
- 4 Basisconcepten om centrale problemen kwantummechanisch correct op te lossen zoals het orbitaal draaimoment en sferische harmonieken beheersen.
- 5 Kwantummechanische beschrijving van het waterstofatoom beheersen.
- 6 Belang van symmetrie voor spectroscopie en het vormen van de chemische binding inzien.

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

Studiemateriaal

Type: Syllabus

Naam: Moleculaire structuur

Richtprijs: € 5

Optioneel: ja

Taal : Nederlands

Aantal pagina's : 150

Beschikbaar op Ufora : Nee

Online beschikbaar : Nee

Beschikbaar in de bibliotheek : Nee

Beschikbaar via studentenvereniging : Nee

Bijkomende info: Het cursusmateriaal voor het vak Moleculaire structuur bestaat uit een syllabus en slides. De slides zullen op Ufora geplaatst worden gedurende het academiejaar en er is gelegenheid om de syllabus aan te kopen

Type: Slides

Naam: Slides

Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding

Optioneel: nee

Taal : Nederlands

Beschikbaar op Ufora : Ja

Online beschikbaar : Ja

Beschikbaar in de bibliotheek : Nee

Beschikbaar via studentenvereniging : Nee

Referenties

- J. Michael Hollas, Modern Spectroscopy John Wiley & Sons
- B. H. Bransden and G. J. Joachain, Introduction to Quantum Mechanics, Longman 1989

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

De lesgever en de assistenten zijn beschikbaar voor en na de lessen of op afspraak.

Evaluatiemomenten

periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Schriftelijke evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Schriftelijke evaluatie

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

(Goedgekeurd)

Niet van toepassing

Toelichtingen bij de evaluatievormen

Periodegebonden evaluatie: schriftelijk examen theorie met gesloten boek ,
schriftelijk examen oefeningen met gesloten boek.

Een formularium wordt ter beschikking gesteld tijdens het examen.

Eindscoreberekening