

Kwantumchemische methoden (C002962)

Wegens Covid19 kan mogelijk afgeweken worden van de onderwijs- en evaluatievormen. Dergelijke afwijkingen zullen via Ufora worden gecommuniceerd.

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

Studiepunten 3.0 **Studietijd** 90 u **Contacturen** 30.0 u

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2020-2021

A (semester 2) Engels Gent hoorcollege 20.0 u

Lesgevers in academiejaar 2020-2021

Bultinck, Patrick WE06 Verantwoordelijk lesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2020-2021

[Master of Science in Chemistry](#) **stptn** 3 **aanbodssessie** A

Onderwijstalen

Engels

Trefwoorden

Advanced quantum chemistry, Electron correlation, Density Functional theory, Reactivity

Situering

This course is a 2nd Master advanced quantum chemistry course, aiming at augmenting the students knowledge of advanced quantum chemistry so they are able to apply these methods independently and judge published results critically.

Inhoud

- 1 Hartree-Fock theory revisited
- 2 Electron correlation
- 3 Capita selecta of modern theories

Begincompetenties

Studenten moeten een degelijke voorkennis kwantumchemie bewijzen door credit behaald te hebben voor Kwantumchemie en Chemische binding. Alternatief kunnen credits voor equivalente vakken worden aanvaard waarbij de equivalentie wordt beoordeeld door de lesgever.

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 apply quantum chemical techniques in a broader chemical environment.

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

Leermateriaal

Boek: "Modern Quantum Chemistry: introduction to advanced electronic structure

theory" A. Szabo & N.S. Ostlund, Dover Publications, ISBN 0-486-69186-1. Geraamde totaalprijs: 20 EUR

Referenties

"A Chemist's guide to density functional theory" W. Koch & M.C. Holthausen, Wiley-VCH, ISBN 3-527-29918-1

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

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Interactive support via the Ufora online system

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

During the course, students will have to write several reports and computer algorithms to show they master the subject. The union of all these reports are the basis for the final mark.

Eindscoreberekening

Werkstuk: 100%