

Elektronische structuur (C003972)

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 5.0 **Studietijd** 135 u **Contacturen** 45.0 u

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2020-2021

A (semester 1)	Nederlands	Gent	werkcollege: geleide oefeningen	22.5 u
			hoorcollege	22.5 u

Lesgevers in academiejaar 2020-2021

Bultinck, Patrick	WE06	Verantwoordelijk lesgever
Acke, Guillaume	WE06	Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2020-2021

	stptn	aanbodssessie
Bachelor of Science in de chemie	5	A
Schakelprogramma tot Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Materials and Nano Chemistry)	5	A
Vorbereidingsprogramma tot Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Materials and Nano Chemistry)	5	A

Onderwijstalen

Nederlands

Trefwoorden

Kwantumchemie, kwantummechanica, theoretische chemie

Situering

Het opleidingsonderdeel 'Elektronische Structuurmethodes' is een vak binnen de leerlijn fysische chemie. Het beoogt een grondige kennis van methoden voor het benaderend oplossen van niet exact oplosbare problemen in de kwantummechanica van atomen en moleculen en een introductie tot elektroncorrelatie. De nadruk ligt hierbij op het fundamentele inzicht in de theorie en toepassing van elektronische structuurmethoden voor atomen en moleculen met behulp van enkele Slater determinant methoden die tot in detail worden uitgewerkt. Het opleidingsonderdeel maakt gebruik van vaardigheden in modelleren en simuleren.

Inhoud

- Van postulaten tot model systemen: Fundamenten van de kwantummechanica, Translatie, vibratie en rotatie, Atomaire structuur: waterstofachtige atomen
- De noodzaak van benaderende methoden: Variatietheorie, Perturbatietheorie
- Van één-elektron naar meer-elektron atomen: Koppelen van angulaire momenta, Spectrum van atomair waterstof, Meer-elektron atomen
- Van één atoom naar meerdere atomen: Born-Oppenheimer approximatie
- Moleculair orbitaal theorie: Hückel theorie, Hartree-Fock theorie
- Voorbij de Hartree-Fock benadering: Configuratie interactie

Begincompetenties

Dit opleidingsonderdeel bouwt verder op bepaalde eindcompetenties van de opleidingsonderdelen:

- Algemene chemie
- Chemische structuren
- Wiskunde: basisconcepten
- Wiskunde: gevorderde technieken

- Fysica: mechanica
- Fysica: golven, optica en thermodynamica

Eindcompetenties

- 1 De student heeft inzicht in de fundamentele aspecten van de kwantummechanische theorieën zoals gebruikt bij niet exact oplosbare problemen.
- 2 De student begrijpt de kracht en beperkingen van de methodes voor de bepaling van de elektronisch structuur.
- 3 De student kan voor relatief eenvoudige systemen de elektronische structuur modellen ontwerpen en de oplossingen daarvan interpreteren.

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, werkcollege: geleide oefeningen

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

Omwille van COVID19 kunnen gewijzigde werkvormen uitgerold worden indien dit noodzakelijk blijkt.

Leermateriaal

Een geïntegreerde cursus wordt via Ufora aangeboden, waarbij cursusnota's en opgaves van werkcolleges worden aangevuld met weblectures en kennisclips. Elke student moet over een eigen computer met webcam en microfoon beschikken.

Referenties

- "Molecular Quantum Mechanics, 5th edition", P. W. Atkins en R. S. Friedman (Oxford University Press), ISBN: 978-0199541423
- "Quantum Chemistry, 2nd edition", D. A. McQuarrie (University Science Books), ISBN: 978-1891389504
- "Introduction to quantum mechanics, 2nd edition", B.H. Bransden en C.J. Joachain (Longman Scientific), ISBN: 978-0582356917

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Interactieve ondersteuning via Ufora 'Discussions'. Individuele uitleg door lesgevers/assistenten: op elektronische afspraak via MS Teams.

Evaluatiemomenten

periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Schriftelijk examen met open vragen, mondeling examen

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Schriftelijk examen met open vragen, mondeling examen

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Niet van toepassing

Toelichtingen bij de evaluatievormen

De evaluatie gaat zowel over de hoorcolleges (mondeling examen met schriftelijke voorbereiding) als over de werkcolleges (schriftelijk examen, open boek). Het examen toetst (1) het inzicht in de elektronische structuurmethodes, (2) het vermogen om die toe te passen op chemische problemen en (3) resultaten bekomen met die methodes te interpreteren.

Eindscoreberekening

Het examen bestaat uit twee luiken: het theorieluik (waarvan één onderdeel mondeling met schriftelijke voorbereiding en één onderdeel louter schriftelijk) beoordeeld voor 10 van de 20 punten en het oefeningenluik (waarvan het enige onderdeel louter schriftelijk is) dat tevens voor 10 van de 20 punten telt. Studenten moeten aan alle onderdelen van het examen deelnemen om te kunnen slagen voor het examen. Wanneer men niet deelneemt aan de evaluatie van één of meer onderdelen of minder dan 4/10 heeft voor

één van de luiken, kan men niet meer slagen voor het geheel van het opleidingsonderdeel. Indien de eindscore toch een cijfer van tien of meer op twintig zou zijn, wordt dit teruggebracht naar een niet-delibereerbaar cijfer.