

Symmetrie en spectroscopie (C003973)

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 2)	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

symmetrie, groepentheorie, chemische binding, spectroscopie

Situering

Dit opleidingsonderdeel kadert binnen de leerlijn fysische chemie en heeft als doel de studenten vertrouwd te maken met groepentheoretische methoden en de toepassingen hiervan voor elektronische toestanden en spectroscopische eigenschappen van atomen en moleculen. Het opleidingsonderdeel maakt gebruik van vaardigheden in modelleren en simuleren.

Inhoud

- Groepentheorie en symmetrie: Symmetrie-elementen en operaties, Groepentheoretische benadering van symmetrie, Voorstellingen en hun reductie tot niet-reduceerbare voorstellingen, Het groot orthogonaliteitstheorema en projectieoperatoren, Symmetrie-aangepaste lineaire combinaties.
- Symmetrie en moleculair orbitaaltheorie: Hückel theory, Ligandveldtheorie, Jahn-Teller effect.
- Symmetrie en vibratiespectroscopie: Spectroscopische transities, Vibratoire energie-niveaus van diatomaire moleculen, Vibratoire selectieregels, Vibraties van polyatomaire moleculen.
- Symmetrie en elektronische transities: Elektronische selectieregels, Frank-Condon principe, Vibronische transities.

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 groepentheorie.
- 2 De student begrijpt de kracht en beperkingen van deze methoden.
- 3 De student begrijpt het belang van symmetrie voor het opstellen van kwalitatief correcte MO diagrammen.
- 4 De student begrijpt het verband tussen symmetrie en spectroscopische selectieregels.

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

On campus hoorcollege, online werkcollege: geleide oefeningen met ondersteuning via Ufora en MS Teams. 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 dient over een eigen computer met webcam en microfoon te beschikken.

Referenties

- "Group Theory Applied to Chemistry", A. J. Ceulemans (Springer), ISBN: 978-9402406139
- "Symmetry: An Introduction to Group Theory and Its Applications", R. McWeeny (Dover Publications), ISBN: 978-0486421827
- "Group Theory and Chemistry", D. M. Bishop (Dover Publications), ISBN: 978-0486673554

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

Het examen bestaat uit aan het theorieluik, waarvan één onderdeel mondeling met schriftelijke voorbereiding en één onderdeel louter schriftelijk, en een oefeningenluik, waarvan het enige onderdeel louter schriftelijk is.

Eindscoreberekening

Zowel het theorieluik als het oefeningenluik worden respectievelijk beoordeeld voor tien van de twintig punten. Studenten die niet deelnemen aan de evaluatie van één of meer onderdelen of minder dan vier op tien halen voor één van de luiken, kunnen niet meer slagen voor het geheel van het opleidingsonderdeel. Indien in dat geval de eindscore toch een cijfer van tien of meer op twintig zou zijn, wordt dit teruggebracht naar een niet-delibereerbaar cijfer.