

Kwantumkijk op chemie (C004360)

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 4.0 **Studietijd** 120 u **Contacturen** 37.5 u

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2020-2021

A (semester 2)	Nederlands	Gent	hoorcollege	22.5 u
			werkcollege: geleide oefeningen	15.0 u

Lesgevers in academiejaar 2020-2021

Bultinck, Patrick	WE06	Verantwoordelijk lesgever
Hens, Zeger	WE06	Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2020-2021

	stptn	aanbodssessie
Schakelprogramma tot Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting (Bio)Organic and Polymer Chemistry)	4	A
Schakelprogramma tot Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Analytical and Environmental Chemistry)	4	A
Schakelprogramma tot Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Materials and Nano Chemistry)	4	A
Vorbereidingsprogramma tot Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting (Bio)Organic and Polymer Chemistry)	4	A
Vorbereidingsprogramma tot Master of Science in Chemistry (afstudeerrichting Materials and Nano Chemistry)	4	A

Onderwijstalen

Nederlands

Trefwoorden

atomen en moleculen, ruimtelijke opbouw, elektronische structuur, chemische binding, kwantummechanica, stereochemie, conformatie

Situering

Het opleidingsonderdeel 'kwantumkijk op chemie' past binnen de leerlijn algemene chemie. Het beoogt een grondige kennis van de ruimtelijke opbouw en elektronische structuur van moleculen en de relatie tussen beide. Dit omvat een grondige kennismaking volgt met de basisbegrippen van de kwantummechanica en het gebruik ervan in het beschrijven en begrijpen van elektronische structuur en de chemische binding.

De nadruk ligt hierbij op het aanleren van algemene basiskennis waar meer gespecialiseerde leerlijnen op kunnen voortbouwen. Het opleidingsonderdeel maakt gebruik van vaardigheden in modelleren en simuleren.

Inhoud

- Functies en vectoren; operatoren en matrices
- De Schrödinger vergelijking
- Chemische 2-toestandssystemen
- Tijdsafhankelijke systemen
- Meer elektronsystemen
- Golfmechanica – exact oplosbare problemen
- Golfmechanica – sferische potentialen
- Kwantummechanische beschrijving van atomaire systemen
- Kwantummechanische beschrijving van moleculen

Begincompetenties

Het vak vereist geen specifieke begincompetenties.

Eindcompetenties

- 1 De student heeft inzicht in de beschrijving van atomen, moleculen en de chemische binding en is vertrouwd met het taalgebruik en de bijhorende interpretaties van de concepten aan de basis ervan.
- 2 De student heeft inzicht in de wijze waarop het voorgaande leidt tot de opbouw en structuur van het Periodiek Systeem.
- 3 De student heeft inzicht in de verschillende chemische bindingstypes verworven en kan deze herkennen en correct beschrijven.
- 4 De student is vertrouwd met het concept resonantie en de precieze betekenis en toepassing ervan; hij/zij kan relevante resonantiestructuren afleiden.
- 5 De student kan de verschillende soorten isomerie herkennen, beschrijven en benoemen.
- 6 De student kan de voornaamste functionele groepen van organische moleculen herkennen en benoemen.
- 7 De IUPAC-naam van eenvoudige anorganische en organische verbindingen kunnen afleiden en van de IUPAC naam ook de bijhorende structuurformule kunnen opstellen.
- 8 De symmetrie van een molecule kunnen analyseren en toepassen bij het voorspellen van ruimtelijke eigenschappen, kristalvormen en orbitalen.
- 9 De student is vertrouwd met het begrip conformatie en kan eenvoudige conformationele analyses uitvoeren om van hieruit het dynamisch gedrag van moleculen af te leiden en te verklaren.
- 10 De student heeft inzicht in de basisprincipes van de kwantummechanica en kan ze toepassen binnen de context van 2-niveausystemen.
- 11 De student heeft inzicht in de elektronische structuur van atomen en de kwantummechanische beschrijving hiervan.
- 12 De student heeft inzicht in de chemische binding en de kwantummechanische beschrijving hiervan.
- 13 De student is in staat problemen in verband met chemische structuren op te lossen door te redeneren vanuit een kwantummechanische context.

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

Leermateriaal

- Engelstalige cursusnota's en Engelstalig referentiemateriaal.
- Achtergrondteksten en links op Ufora.
- De student beschikt over een eigen computer.

Referenties

- Leonard Susskind and Art Friedman, Quantum Mechanics, the theoretical minimum. Penguin books, UK, 2015. ISBN 9780141977812 (ongeveer 15 EUR) – optioneel.
- Colleges (video) uit dit boek op , iTunes of Youtube (gratis) – verplicht te bekijken.

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Evaluatiemomenten

periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Schriftelijk examen met open vragen

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Schriftelijk examen met open vragen

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Niet van toepassing

Toelichtingen bij de evaluatievormen

Het examen betreft zowel een deel met theorievragen als een deel oefeningen.

Eindscoreberekening

Het luik theorievragen telt voor 40% mee, de oefeningen voor 60%.