



Kursplan

för kurs på grundnivå

Kemisk dataanalys

Computational Data Analysis in Chemistry

4.0 Höskolepoäng

4.0 ECTS credits

Kurskod:	KZ2006
Gäller från:	HT 2014
Fastställd:	2014-03-11
Institution	Institutionen för material- och miljökemi
Huvudområde:	Kemi
Fördjupning:	G1N - Grundnivå, har endast gymnasiala förkunskapskrav

Beslut

Denna kursplan är fastställd av Naturvetenskapliga fakultetsnämnden vid Stockholms universitet 2014-03-11.

Beslut om upphävande är fattat av Områdesnämnden för naturvetenskap 2017-06-22.

Förkunskapskrav och andra villkor för tillträde till kursen

Fysik B/Fysik 2, Kemi B/Kemi 2 och Matematik D/Matematik 4.

Kursens uppläggning

Provkod	Benämning	Höskolepoäng
MOM1	Teori	3
MOM2	Datorlaborationer	1

Kursens innehåll

a. Kursen är en introduktion till att använda datorn som ett verktyg för att göra beräkningar och analyser av data genererade genom kemiska experiment och modeller. För detta ändamål används huvudsakligen programmet Matlab. Kursen innehåller numeriska beräkningar med matematiska funktioner relaterade till kemiska begrepp såsom orbitaler, reaktionshastigheter och termodynamiska storheter. Vidare övas analys och bearbetning av data (specifikt hur man ritar och anpassar vetenskapliga data), samt grundläggande programmering. Kursen inkluderar tillämpningar från grundläggande kemi med tonvikt på statistisk analys, och ett systematiskt tillvägagångssätt för att behandla rådata (t.ex. experimentella resultat) i olika former. I kursen behandlas även några yrkesknep för hur man gör figurer med den höga kvalitet som krävs för vetenskaplig publicering.

b. Kursen består av två moment:

1. Teori (Theory) 3 hp
2. Datorlaborationer (Computer Excercises) 1 hp

Förväntade studieresultat

Efter att ha genomgått kursen förväntas studenten:

- kunna använda Matlab för grundläggande numeriska beräkningar och dataanalys såsom att manipulera funktioner, rita grafer samt behandla och analysera data utifrån statistiska egenskaper
- behärska grunderna i programmering, såsom villkorssatser, loopar och funktioner
- kunna skriva skript som omvandlar rådata genererade i experiment till en sådan form som kan enkelt visualiseras
- kunna producera figurer med tillräcklig kvalitet för att kunna accepteras i en tidskrift med peer-review

förfarande

Undervisning

Undervisningen består av föreläsningar, övningar samt datorlaborationer.

Deltagande i datorlaborationer och därmed integrerad gruppundervisning är obligatoriskt. Om särskilda skäl föreligger kan examinator efter samråd med vederbörande lärare medge den studerande befrielse från skyldigheten att delta i viss obligatorisk undervisning.

Kunskapskontroll och examination

a. Kunskapskontroll av moment 1 sker genom skriftligt prov. Kunskapskontroll av moment 2 sker genom skriftliga laborationsredogörelser.

b. Betygssättning sker enligt sjugradig målrelaterad betygsskala:

A = Utmärkt

B = Mycket bra

C = Bra

D = Tillfredsställande

E = Tillräckligt

Fx = Otillräckligt

F = Helt Otillräckligt

Betygssättning av moment 2 sker enligt tvågradig betygsskala: godkänd (G) eller underkänd (U).

c. Kursens betygsriterier delas ut vid kursstart.

d. För godkänt krävs lägst betygsgraden E, godkänt betyg på moment 2, samt deltagande i all obligatorisk undervisning.

Skriftliga laborationsredogörelser ska vara inlämnade senast 2 veckor efter laborationens genomförande. Vid underkännande på en laborationsredogörelse ska komplettering lämnas in senast två veckor efter återlämnandet.

e. Studerande som underkänts i ordinarie prov har rätt att genomgå ytterligare prov så länge kursen ges. Antalet provtillfällen är inte begränsat. Med prov jämföras också andra obligatoriska kursdelar. Studerande som godkänts på prov får inte genomgå förnyat prov för högre betyg. Studerande som underkänts på prov två gånger har rätt att begära att annan examinator utses vid nästkommande prov. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen. Kursen har minst två examinationstillfällen per läsår de år då undervisning ges. Mellanliggande år ges minst ett examinationstillfälle.

f. Möjlighet till komplettering av betyget Fx upp till godkänt betyg ges inte på denna kurs.

Övergångsbestämmelser

Studerande kan begära att examination genomförs enligt denna kursplan även efter det att den upphört att gälla, dock högst tre gånger under en tvåårsperiod efter det att undervisning på kursen upphört. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen. Bestämmelsen gäller även vid revidering av kursplanen.

Övrigt

Kursen ingår i Kandidatprogram i kemi och kan även läsas som fristående kurs.

Kurslitteratur

Kurslitteratur beslutas av institutionsstyrelsen och redovisas därefter i bilaga till kursplanen.