



# Kursplan

för kurs på avancerad nivå

**Kemisk modellering**  
**Chemical Modelling**

**7.5 Högskolepoäng**  
**7.5 ECTS credits**

<b>Kurskod:</b>	KZ7002
<b>Gäller från:</b>	HT 2016
<b>Fastställt:</b>	2016-02-29
<b>Institution</b>	Institutionen för material- och miljö kemi
<b>Huvudområde:</b>	Kemi
<b>Fördjupning:</b>	A1N - Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

## Beslut

Denna kursplan är fastställd av Områdesnämnden för naturvetenskap vid Stockholms universitet 2016-02-29.

## Förkunskapskrav och andra villkor för tillträde till kursen

För tillträde till kursen krävs kunskaper motsvarande avslutade kurser om 60 högskolepoäng i kemi, varav 15 högskolepoäng i fysikalisk kemi, samt 15 högskolepoäng matematik. Engelska 6/Engelska B eller motsvarande.

## Kursens uppläggning

Provkod	Benämning	Högskolepoäng
DEL1	Teori	4.5
DEL2	Laborationer	3

## Kursens innehåll

a. Kursen inleds med grundläggande delar av kvantmekanik och statistisk termodynamik. Vidare introduceras teori för molekylära växelverknings och modeller, med olika approximationsnivåer, som används för att beskriva dessa. Flera viktiga beräkningsmetoder, tillämpade inom olika grenar av kemin, presenteras: till dessa hör kvantkemi och simuleringar med Monte Carlo, molekylodynamik och mesoskopiska metoder. Olika fysikaliska modeller introduceras för att täcka längdskalorna från atomär nivå till makroskopiska system med multiskaliga metoder.

b. Kursen består av följande delar:

1. Teori (Theory) 4.5 hp
2. Laborationer (Laboratory Exercises) 3 hp

## Förväntade studieresultat

Efter att ha genomgått kursen förväntas studenten:

För kursdel teori:

- kunna redogöra för grundläggande teori bakom kvantkemiska beräkningar och simuleringar med Monte Carlo, molekylodynamik och mesoskopiska metoder.
- kunna redogöra för grundläggande begrepp i kvantmekanik och statistisk termodynamik, samt hur dessa är relaterade till datorberäkningar och simuleringar av kemiska system.

För kursdel laborationer:

- kunna utvärdera resultat från beräkningar och simuleringar, samt relatera dessa till experimentella resultat.

- kunna välja lämpliga modeller och beräkningsmetoder för att lösa ett visst kemiskt problem.

### **Undervisning**

Undervisning består av föreläsningar, laborationer och seminarier.

Deltagande i laborationer, seminarier och därmed integrerad undervisning är obligatoriskt. Om särskilda skäl föreligger kan examinator efter samråd med vederbörande lärare medge den studerande befrielse från skyldigheten att delta i vissa obligatoriska moment.

### **Kunskapskontroll och examination**

a. Kursen examineras på följande vis: Kunskapskontroll sker genom skriftligt prov och skriftliga laborationsrapporter.

Om undervisningen sker på engelska kan även examination komma att genomföras på engelska.

b. Betygssättning sker enligt sjugradig målrelaterad betygsskala:

A = Utmärkt

B = Mycket bra

C = Bra

D = Tillfredsställande

E = Tillräckligt

Fx = Underkänd (något mer arbete krävs)

F = Underkänd (mycket mer arbete krävs)

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

c. Kursens betygskriterier för teorimomentet delas ut vid kursstart.

d. För godkänt krävs lägst godkänt betyg på samtliga ingående delar samt deltagande i all obligatorisk undervisning.

e. Studerande som underkänts i ordinarie prov har rätt att genomgå ytterligare prov så länge kursen ges. Antalet provtillfällen är inte begränsat. Med prov jämställs också andra obligatoriska kursdelar. Studerande som godkänts på prov får inte genomgå förnyat prov för högre betyg. En student, som utan godkänt resultat har genomgått två prov för en kurs eller en del av en kurs, har rätt att få en annan examinator utsedd, om inte särskilda skäl talar mot det. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen. Kursen har minst två examinationstillfällen för varje del per läsår de år då undervisning ges. Mellanliggande år ges minst ett examinationstillfälle.

f. Möjligheten till komplettering av betyg 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.

### **Begränsningar**

Kan ej ingå i examen tillsammans med kursen Materialkemisk modellering, 7,5 hp (KY8008), (KZ8004), Molekylär modellering (KB8021).

### **Övrigt**

Kursen ingår i kandidatprogrammet i kemi och masterprogrammet i materialkemi, men kan också läsas som fristående kurs.

### **Kurslitteratur**

Kurslitteratur beslutas av institutionsstyrelsen och publiceras på [www.kemi.su.se](http://www.kemi.su.se) senast 2 månader före kursstart.