

# Kursplan

för kurs på avancerad nivå

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

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

**Kurskod:** KZ7002  
**Gäller från:** HT 2020  
**Fastställd:** 2016-02-29  
**Ändrad:** 2020-08-17

**Huvudområde:** Kemi  
**Fördjupning:** 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 och reviderad 2020-08-17.

## 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 |
|---------|-----------|---------------|
| TEOR    | Teori     | 4.5           |
| PROJ    | Projekt   | 3             |

## Kursens innehåll

a. Kursen inleds med grundläggande delar av kvantmekanik och statistisk termodynamik. Vidare introduceras teori för molekylära växelverkningsmodeller, 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 mesoskaliga metoder. Olika fysikaliska modeller introduceras för att täcka längdskalorna från atomär nivå till makroskopiska system med multiskaliga metoder. Tillämpningar inom hållbar kemi, organisk och biokemi diskuteras.

b. Kursen består av följande delar:

1. Teori (Theory) 4.5 hp
2. Projekt (Project) 3 hp

## Förväntade studieresultat

Efter att ha genomgått kursen förväntas studenten kunna:

För kursdel teori:

- redogöra för grundläggande teori bakom kvantkemiska beräkningar och simuleringar med Monte Carlo, molekylodynamik och mesoskaliga metoder.
- redogöra för grundläggande begrepp i kvantmekanik och statistisk termodynamik, samt hur dessa är relaterade till datorberäkningar och simuleringar av kemiska system
- relatera kemiska modelleringsmetoder till hållbarhetsfrågor i det omgivande samhället

För kursdel projekt:

- välja lämpliga modeller och beräkningsmetoder för att lösa ett visst kemiskt problem.
- kunna utvärdera resultat från beräkningar och simuleringar, samt relatera dessa till experimentella resultat.

### **Undervisning**

Undervisning består av föreläsningar, seminarier, och projektarbete.

Kursen ges på engelska.

### **Kunskapskontroll och examination**

a. kursen examineras på följande vis:

Kunskapskontroll för del 1 sker genom skriftligt prov.

Kunskapskontroll för del 2 sker genom skriftlig projektredovisning.

Examinator har möjlighet att besluta om anpassad eller alternativ examination för studenter med funktionsnedsättning.

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

b. För godkänt slutbetyg krävs deltagande i projektarbete och seminarier.

Om särskilda skäl föreligger kan examinator efter samråd med vederbörande lärare medge den studerande befrielse från skyldigheten att delta i viss obligatorisk undervisning.

c. Betygsättning: Kursens slutbetyg sätts enligt sjugradig målrelaterad skala:

A = Utmärkt

B = Mycket bra

C = Bra

D = Tillfredsställande

E = Tillräckligt

Fx = Underkänd, något mer arbete krävs

F = Underkänd, mycket mer arbete krävs

Betygsättning av del 1 sker enligt sjugradig målrelaterad skala.

Betygsättning av del 2 sker enligt tvågradig betygsskala: underkänt (U) eller godkänt (G).

För godkänt slutbetyg krävs godkänt betyg på samtliga ingående delar.

Kursens slutbetyg sätts utifrån betygsättning på del 1.

d. Kursens betygsriterier delas ut vid kursstart.

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 tre examinationstillfällen per läsår de år då undervisning ges. För de läsår som kursen inte ges erbjuds 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 kursen har avvecklats. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen. Bestämmelsen gäller även vid revidering av kursplanen och revidering av kurslitteratur.

### **Begränsningar**

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

### **Övrigt**

Kursen ingår i kandidatprogrammet i kemi och masterprogrammet i hållbar kemi, 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.