

Datorsimuleringar inom kemin, påbyggnadskurs, 5 poäng (Computational Chemistry, advanced course, 5 credits)

Kursplanen är fastställd av matematisk-naturvetenskapliga fakultetsnämnden
2000-06-07.

1. Placering i utbildningen och förkunskapskrav

Kursen ingår i matematisk-datalogiska linjens inriktning mot beräkningsteknik, men kan också läsas som fristående kurs. För tillträde till kursen krävs kunskaper motsvarande totalt 70 poäng, hämtade från ämnena beräkningsteknik och matematik.

2. Mål

Kursens mål är att ge en introduktion till beräkningstekniska problem inom datorsimulerad kemi, så att studenterna ska kunna identifiera numeriska problem och få en inblick i existerande mjukvara inom området.

3. Innehåll

Olika numeriska tekniker och modeller som används inom beräkningskemi: molekylmekanik, potentialenergi-ytor, kraftfält, numeriska metoder för energiminimering. Kvantmekaniska beräkningar, ab initio och semiempiriska numeriska metoder för stora egenvärdesproblem, ordinära differentialekvationer.

4. Undervisning

Undervisningen består av föreläsningar.

Om särskilda skäl föreligger kan examinator, efter samråd med kursansvarig lärare, medge den studerande befrielse från skyldigheten att delta i vissa obligatoriska moment.

5. Examination

Examinationen utgörs av tentamen och datorlaborationer.

Studerande som godkänts på tentamen får ej undergå förnyad tentamen för högre betyg. Studerande som underkänts i ordinarie tentamen har rätt att delta vid ytterligare tentamenstillfällen. Studerande som underkänts på tentamen två gånger har rätt att begära att annan lärare än den kursansvarige utses för att bestämma betyg på kursen. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen.

Som betyg på kursen används något av uttrycken underkänd, godkänd eller väl godkänd.

6. Litteratur

Kurslitteratur fastställs av institutionsstyrelsen.