FBB3570 Flerskalig modellering i kemi och biologi 10,0 hp

Multiscale Modelling in Chemistry and Biology

Fastställande

Skolchef vid CBH-skolan har beslutat att fastställa denna kursplan. Diarienummer: C-2018-0730.

Betygsskala

P, F

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Doktorander med grundläggande kunskaper inom molekylär modellering, särskilt kvantkemi.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Att tillhandahålla kunskaper om fundamentala begrepp, principer och metoder inom multiskals-modellering. Att lära sig att praktiskt utföra multiskals-beräkningar för att studera stora molekylära system.

Målgrupp: Doktorander

Kursinnehåll

1. Introduktion till multiskals-modellering
2. Översikt av elektronstruktur-metoder
3. Modellering av intermolekylär växelverkan
4. Metoder för atomistisk modellering
5. Mesoskopiska simuleringsmetoder
6. Dataövningar
7. projekt

Examination

- DEL1 - Deltagande, 4,0 hp, betygsskala: P, F
- INL1 - Inlämning, 2,0 hp, betygsskala: P, F
- PRO1 - Projekt, 4,0 hp, betygsskala: P, F

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

Övriga krav för slutbetyg

80 % närvaro på lektioner. Genomförande av alla övningar och projekt och presentation av resultaten.

Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.
- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.