FCB3204 Molekylär modellering 7,5 hp

Molecular Modeling

Fastställande

Skolchef vid CBH-skolan har 2021-04-09 beslutat att fastställa denna kursplan att gälla från och med HT2021, diarienummer: C-2021-0603

Betygsskala

P, F

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Behörig till studier på forskarnivå

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter fullföljande av kursen förväntas studenten

- visa fördjupad kunskap och analytisk förmåga inom molekylär modellering motsvarande utbildningsnivån för kursen, samt förmåga att kritiskt granska andras arbeten inom området [LAB1,PRO1]
- visa god förmåga att förklara och analysera komplexa begrepp inom molekylär modellering utifrån relevant forskningslitteratur, samt på ett pedagogiskt sätt kommunicera kunskapen skriftligt och muntligt [PRO1]
- kunna reflektera över och beskriva hur vetenskapliga frågeställningar inom områdets forskning kan bidra till hållbar samhällsutveckling [PRO1]

Kursinnehåll

Kursens teoriavsnitt avhandlar ett antal aspekter inom molekylär modellering:

- Grundläggande kvantkemi: Molekylorbitalteori, semiempiriska metoder
- Grundläggande täthetsfunktionalsteori (DFT)
- Molekylmekanik och molekyldynamik
- Monte Carlo metoder
- Energiminimering och potentialenergiytor
- QM/MM metoder
- Solvatisering och omgivningseffekter
- Teoretiska metoder inom läkemedelskemi: dockning, proteinstruktur prediktion, QSAR
- Simulering av kemiska reaktioner i lösningar
- Modellering av enzymatisk katalys

Examination

- PRO1 - Projekt, 6,0 hp, betygsskala: P, F
- LAB1 - Laborationer, 1,5 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.

Betygskriterier specificeras i kurs-PM.

Övriga krav för slutbetyg

För slutbetyg krävs 90 % närvaro på föreläsningar, skriftlig kritisk reflektion för utvalda vetenskapliga artiklar inom ämnet, godkänd skriftlig projektrapport och genomförd muntlig projektpresentation (PRO1); samt närvaro på datorlaborationer och godkända laborationsrapporter (LAB1).

Övergångsbestämmelser

Om kursen avvecklas ges studenten möjlighet att examineras på kursen under ytterligare två läsår.

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.