



BB2300 Beräkningskemi 7,5 hp

Computational Chemistry

Fastställande

Betygsskala

A, B, C, D, E, FX, F

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Bioteknik

Särskild behörighet

****För programstudenter vid KTH krävs:**

****Minst 150 högskolepoäng från årskurs 1, 2 och 3 varav minst 100 högskolepoäng från årskurs 1 och 2 samt kandidatexamensarbete måste vara avklarade. I de 150 poängen skall ingå avklarade kurser motsvarande minst 20 hp matematik, numeriska metoder, data, varav minst 5 hp utgörs av numeriska metoder och data, 20 hp kemi där även kurs i kemisk mätteknik kan ingå samt 20 hp bioteknik eller molekylärbiologi**

För fristående studerande krävs:

Totalt 20 högskolepoäng (hp) inom biokemi, mikrobiologi och genetik/molekylärbiologi. 30 högskolepoäng (hp) kemi, samt totalt 20 högskolepoäng (hp) inom matematik och programmering, samt bioinformatik 3,5 högskolepoäng (hp) och statistik 3,5 högskolepoäng (hp) eller motsvarande, samt dokumenterade kunskaper i engelska motsvarande Engelska B

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

The goal with this course is to acquire knowledge in Computational Chemistry and some basic skills in carrying out calculations on problems of chemical interest. Except for learning some basic theoretical models, the emphasis is to actually carry out the calculations, and to learn about possible applications and limitations. The course contains a number of theoretical problems and descriptions how to solve these problems.

Kursinnehåll

Born-Oppenheimer approximation, Själv konsistenta fält approximationen. Elektronkorrelation. Reaktionsmodellering. Optiska, elektriska och magnetiska egenskaper. Lösningseffekter. Molekyldynamik. Presentation och analys och några karaktäristiska exempel.

Kursupplägg

Organisation:

Kursen ges i 12 dubbeltimmar. Ett antal övningar delas ut som ska lösas under kursens gång. Varje övning kommer att gås igenom gemensamt.

Kurslitteratur

Laborationsbeskrivningar innehållande teori, datorinstruktioner, uppgifter och frågor. Grundläggande kursböcker är Szabo-Östlund "Modern Quantum Chemistry" (Dover Publications), och Helgaker m fl. "Electronic Structure Theory" (John Wiley).

Examination

- ÖVN1 - Beräkningsuppgifter, 7,5 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, 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 enskilda studenter.

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

Övriga krav för slutbetyg

En skriftlig examination, redogörelse för datoruppgifterna och svar på frågor (ÖVN1, 7,5 hp, betygsskala A-F).

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.