



FCK3001 Beräkningskemi 7,5 hp

Computational Chemistry

Fastställande

Kursplan för FCK3001 gäller från och med VT19

Betygsskala

P, F

Utbildningsnivå

Forskarnivå

Särskild behörighet

Behörighet till studier på forskarnivå samt förkunskaper i kvantmekanik på avancerad nivå

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter avslutad kurs ska studenten ha kunskap och förmåga att

- för kursens nivå visa tillräcklig förvärvad kunskap inom kursens specialiserade ämnen.

- utforma, planera och genomföra ett projekt för att angripa ett vetenskapligt problem med datorbaserad modellering inom ramen för kursens ämnesområde.
- presentera och motivera muntligt egna projektresultat och kritiskt utvärdera egna och andras presenterade projektresultat.
- reflektera över det valda vetenskapliga problemet med hänsyn till miljö-, mänskliga eller samhällseliga aspekter.

Kursinnehåll

Kursen består av två delar som totalt omfattar cirka 200 timmar. Den första delen omfattar 24 lärarledda lektionstimmar, 12 studentledda seminarietimmar, samt individuella självstudier motsvarande ungefär en veckas heltidsstudier. Ämnen som ingår omfattar andrakvantisering för elektronstrukturteori, grupp teori för elektronisk vågfunktion och vibrationell vågfunktion, täthetfunktionell teori för molekyler, korrelerade tillvägagångssätt i elektronstrukturteori, perturbationsteorimetoder, konfigurationsinteraktionsmetoder, kopplade klustermetoder och geminalmetoder.

Den andra delen består av en obligatorisk projektuppgift som utförs under fyra veckor och motsvarar cirka tre veckors heltidsstudier. Eleverna arbetar i små grupper där varje grupp väljer ett vetenskapligt forskningsproblem i beräkningskemi. Projektet utförs autonomt och självständigt genom att läsa och granska den relevanta vetenskapliga litteraturen, utforma en modelleringsstrategi, och utföra beräkningar på högpresterande datorer med hjälp av modern programvara i kvantkemi. Strategi, erhållna resultat och kritisk analys presenterad i form av en skriftlig rapport och en muntlig presentation i form av ett seminarium

Kurslitteratur

Molecular Electronic-Structure Theory, Wiley, 2000, ISBN: 978-0-471-96755-2;
Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University Press, 1994, ISBN: 978-0-19-509276-9.

Examination

- DEL1 - Deltagande, 3,0 hp, betygsskala: P, F
- PRO1 - Rapport, 4,5 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.

Examination för kursens första del utgörs av 80% aktivt deltagande på föreläsningar och seminarier. Examination av projektuppgiften under kursens andra del omfattar en skriftlig projektrapport och ett muntlig projektpresentation.

Övriga krav för slutbetyg

80% aktiv närvaro på föreläsningar och seminarier.
Godkänd projektrapport.
Godkänd muntlig presentation.

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.