



FCB3204 Molekylär modellering

7,5 hp

Molecular Modeling

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

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 molekylodynamik
- 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

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

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.