



BB2300 Beräkningskemi 7,5 hp

Computational Chemistry

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

Fastställande

Kursplan för BB2300 gäller från och med HT07

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Bioteknik

Särskild behörighet

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Kursinnehåll

Born-Oppenheimer approximation, Själv konsistenta fält approximationen. Elektronkorrelation. Reaktions-modellering. 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 enstaka studenter.

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.