



ÖREBRO UNIVERSITET  
INSTITUTIONEN FÖR NATURVETENSKAP

## UTBILDNINGSPLAN

### **PROGRAM I TEORETISK KEMI OCH DATORMODELLERING, 80 POÄNG**

*Programme in Theoretical Chemistry and Computational Modelling, 80 points (120 ECTS credits)*

Utbildningsplanen är fastställd av fakultetsnämnden för medicin, naturvetenskap och teknik den 14 februari 2005.

#### **1 ALLMÄNT**

Utbildningen omfattar 80 poäng (2 års heltidsstudier) och leder fram till en magisterexamen med ämnesdjup i kemi eller fysik. Programmet ges i samarbete med ett fyrtiotal universitet i ett tiotal länder i Europa. Syftet med programmet är att ge fördjupade kunskaper inom teoretisk kemi och datormodellering, med ett omfattande internationellt inslag. Utbildningen innefattar, utöver kemi och fysik, även grundläggande matematiska kunskaper såsom linjär algebra, analys och numeriska metoder. Studierna leder fram till fördjupade kunskaper om metodik och tillämpningar inom teoretisk och datorbaserad modellering av olika processer i kemi och fysik. Exempel på tillämpningsområden är nanoteknologi, läkemedelsdesign, biokemi, materialforskning, atmosfärskemi, miljökemi, m.m. Utbildningen vänder sig till dem som tänkt sig gå vidare till forskarutbildning (doktorandstudier) inom något av ovanstående områden, samt för dem som vill arbeta inom det starkt framväxande området datorbaserad simulering och modellering i industrin. Undervisningen under det andra året ges huvudsakligen på engelska.

#### **2 UTBILDNINGENS MÅL**

##### **2.1 Mål för grundläggande högskoleutbildning**

Den grundläggande högskoleutbildningen skall ge studenterna

- förmåga att göra självständiga och kritiska bedömningar,
- förmåga att självständigt urskilja, formulera och lösa problem, samt
- beredskap att möta förändringar i arbetslivet.

Inom det område som utbildningen avser skall studenterna, utöver kunskaper och färdigheter, utveckla förmåga att

- söka och värdera kunskap på vetenskaplig nivå,
- följa kunskapsutvecklingen, och
- utbyta kunskaper även med personer utan specialkunskaper inom området.

(1 kap. 9 § högskolelagen [HL])

## 2.2 Programmetts mål

Efter avslutad utbildning skall den studerande, utöver de allmänna målen i 1 kap. 9 § HL, ha tillägnat sig:

- kunskaper och färdigheter inom teoretisk kemi, datormodellering och närliggande ämnen.
- förmåga att följa kunskapsutvecklingen inom teoretisk kemi och datormodellering.
- förmåga till informationsutbyte inom teoretisk kemi och datormodellering på internationell vetenskaplig nivå.

## 3 UTBILDNINGEN

### 3.1 Utbildningens huvudsakliga uppläggning och innehåll

Programmetts första år är av nationell karaktär och ägnas framför allt till att uppnå en god grund för teoretisk kemi och datormodellering samt vissa avancerade aspekter inom kemins olika områden. De områden som är extra viktiga i detta avseende är: grundläggande matematik, statistisk mekanik, molekylär kvantmekanik, programmering och numeriska metoder, grupp teori, grundläggande reaktionsdynamik samt grundläggande spektroskopi.

Utbildningens andra år har en markerat internationell karaktär och ger under den inledande delen en solid grund i avancerad teoretisk kemi och datormodellering samt tillämpningar inom de viktigaste områdena i modern kemi, materialvetenskap och biologi. Det andra året inleds med kursen Avancerad teoretisk kemi och datormodellering D, 14 poäng, vilken består av tre veckor gemensam internationell del, som arrangeras vid något av de deltagande universiteterna i Europa, samt efterföljande problemlösning vid hemuniversitetet. Andra delen av det avslutande året är fokuserat på forskning och projektarbete (självständigt arbete på D-nivå), vilket genomförs vid ett av de övriga deltagande lärosätena. Kursen Avancerad teoretisk kemi och datormodellering samt det självständiga arbetet genomförs på engelska.

### 3.2 Rekommenderad studiegång

Flera olika kombinationer av kurser är tänkbara inom ramen för programmetts första år, beroende på studenternas tidigare bakgrund. Nedan anges två alternativ, det ena med kemi som huvudämne, det andra med fysik som huvudämne:

#### Kemi som huvudämne

Matematik A, Linjär algebra L1, 5 poäng

Matematik A, Analys A1, 5 poäng

Matematik A, Analys A2, 5 poäng

Matematik B, Numeriska metoder, 5 poäng, alt. Matematisk statistik, 5 poäng

Fysik A, Termodynamik och vågrörelselära, 5 poäng

Fysik B, Kvantmekanik, 5 poäng

Fysik B, Termodynamik och statistisk fysik, 5 poäng

Fysik C, Fasta tillståndets fysik, 5 poäng

#### Fysik som huvudämne

Kemi A, 20 poäng

Kemi C, Biokemisk modellering, 10 poäng

Kemi C, Självständigt arbete, 10 poäng

Kombinationen av kurser i programmet är individuell, och en rad avvikelser från ovanstående kan förekomma beroende på innehåll och fördjupning i tidigare examen.

Kurser under år två är:

Avancerad teoretisk kemi och datormodellering D, 14 poäng

Kursen är internationell och innehåller momenten avancerad elektronisk strukturlära, molekylär och kemisk dynamik, avancerad beräkningsmetodik, datormodellering och simulering samt kondenserade materiens teori. Kursens inleds i 'intensivform' under tre veckor med undervisning och föreläsningar hela dagar vid ett av de deltagande lärosätena. Denna del läses gemensamt med studenter vid övriga deltagande lärosäten. De efterföljande cirka tio veckorna innehåller problemlösning och datorlaborationer vid hemuniversitetet. Undervisningsspråk är engelska.

Tillämpad modellering D, 2 poäng

Datorbaserad kurs varvad med föreläsningar och exempel på avancerad tillämpad datormodellering vid universitetet.

Självständigt arbete D, 24 poäng

Minst 16 poäng utförs vid ett av de övriga deltagande universiteterna. Arbetet avslutas med muntlig och skriftlig redovisning på engelska vid hemuniversitetet.

### **3.3 Studieformer**

Studierna inom ramen för programmet bedrivs i olika former, såsom föreläsningar, laborationer, lektioner, grupparbeten, självstudier och projektarbeten. För närmare beskrivning av studieformer hänvisas till respektive kursplan.

### **3.4 Obligatorisk närvaro**

Obligatorisk närvaro inom ramen för programmet krävs på kursen Avancerad teoretisk kemi och datormodellering, 14 poäng, samt Självständigt arbete, 24 poäng. Som regel gäller obligatorisk närvaro vid laborationer och övningar i de individuella kurserna. För närmare reglering av eventuell obligatorisk närvaro hänvisas till respektive kursplan.

### **3.5 Tröskelregler**

För att få påbörja år två inom programmet krävs att den studerande har 20 poäng i fysik respektive matematik, alternativt 40 poäng kemi. Tröskelreglerna för de kurser som ingår i programmet anges som särskild behörighet i respektive kursplan.

## **4 INTERNATIONELLT STUDENTUTBYTE**

Programmet är ett europeiskt samarbete mellan ett fyrtiotal universitet. Den internationella kursen Avancerad teoretisk kemi och datormodellering (obligatorisk) arrangeras på olika platser i Europa, och projektarbetet omfattande drygt en termin genomförs vid något av de andra deltagande universiteterna i Europa.

## **5 BETYG OCH EXAMINATION**

Om inte annat är föreskrivet i kursplanen skall betyg sättas på en genomgången kurs.

Betyget skall bestämmas av en av högskolan särskilt utsedd lärare (examinator) (6 kap. 10 § högskoleförordningen [HF]).

Som betyg skall användas något av uttrycken underkänd, godkänd eller väl godkänd om inte högskolan föreskriver annat betygssystem (6 kap. 11 § HF).

## **6 EXAMEN**

Filosofie magisterexamen  
(Degree of Master of Science)

För att erhålla examensbevis krävs:

- 1) fullgjorda kursfordringar om sammanlagt minst 160 poäng
- 2) fördjupade studier på 80-poängsnivån i huvudämnet (ABCD)
- 3) ett självständigt arbete om minst 20 poäng på D-nivå eller två om vardera minst 10 poäng på C- respektive D-nivå i huvudämnet
- 4) i huvudämnet får 40 poäng från forskarutbildningen tillgodoräknas, samt
- 5) kurs(er) om minst 40 poäng i ett annat naturvetenskapligt ämne förutom huvudämnet.

För ytterligare information om examina, se Examensordning för Örebro universitet.

## **7 BEHÖRIGHET FÖR TILLTRÄDE TILL PROGRAMMET**

Behörighet till programmet uppnås av den som avlagt examen om minst 120 poäng varav minst 60 poäng (ABC) i ämnet kemi (inkl. materialvetenskap) eller fysik, eller motsvarande utländska examen.

Utöver detta kan ytterligare behörighetskrav tillkomma vid val av enskilda kurser inom programmet.

## **8 URVAL, PLATSGARANTI OCH FÖRTUR**

I första hand antas sökande med avlagd examen sista ansökningsdag. Meritvärderingen görs efter betyg på kurserna i examen. I andra hand antas behöriga sökande efter antalet högskolepoäng.

## **9 TILLGODORÄKNANDE AV TIDIGARE UTBILDNING**

Beslut om tillgodoräknande för erhållande av betyg på kurs fattas av examinator för den aktuella kursen (6 kap. 10 § HF).

Beslut om tillgodoräknande av kurs i generell examen, om bedömningen sker i samband med begäran om examensbevis och kan betraktas som rutinmässig, fattas av chefen för Utbildnings- och forskningsavdelningen (se Rektors delegationer i utbildningsfrågor).

Beslut om tillgodoräknande i övriga fall fattas av respektive institutionsstyrelse (se Rektors delegationer i utbildningsfrågor).

För ytterligare information, se Tillgodoräknandeordning för grundutbildningen – föreskrifter vid Örebro universitet.

## **10 ÖVRIGT**

För respektive student utses en lokal handledare, som tillsammans med studievägledare och programmets koordinator bistår studenten vid val av kompletterande kurser. Lokale handledaren och programmets koordinator bistår även studenten med kontakter med andra deltagande universitet vid val av projektarbeten.

----

## **IKRAFTTRÄDANDE- OCH ÖVERGÅNGSBESTÄMMELSER**

Denna utbildningsplan träder i kraft från och med höstterminen 2005.