



## **TEORETISK KEMI OCH DATORMODELLERING, 120 HÖGSKOLEPOÄNG**

### **Theoretical Chemistry and Computational Modeling, 120 ECTS**

Utbildningsprogrammet är inrättat den 14 februari 2005 av fakultetsnämnden för medicin, naturvetenskap och teknik. Utbildningsplanen är senast fastställd den 29 mars 2007 av fakultetsnämnden för naturvetenskap och teknik.

#### **1 ALLMÄNT**

Utbildningen omfattar 120 högskolepoäng och leder till en naturvetenskaplig magister- eller masterexamen med huvudområdet kemi. 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 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 önskar gå vidare till studier på forskarnivå inom huvudområdet kemi, samt för dem som vill arbeta inom det starkt framväxande området datorbaserad simulering och modellering i industrin.

#### **2 UTBILDNINGENS MÅL**

##### **2.1 Mål för utbildning på avancerad nivå**

Utbildning på avancerad nivå skall väsentligen bygga på de kunskaper som studenterna får inom utbildning på grundnivå eller motsvarande kunskaper.

Utbildning på avancerad nivå skall innebära fördjupning av kunskaper, färdigheter och förmågor i förhållande till utbildning på grundnivå och skall, utöver vad som gäller för utbildning på grundnivå,

- ytterligare utveckla studenternas förmåga att självständigt integrera och använda kunskaper,
- utveckla studenternas förmåga att hantera komplexa företeelser, frågeställningar och situationer, och
- utveckla studenternas förutsättningar för yrkesverksamhet som ställer stora krav på självständighet eller för forsknings- och utvecklingsarbete.

(1 kap. 9 § högskolelagen [HL])

## **2.2 Mål för Teoretisk kemi och datormodellering**

Mål (utöver de allmänna målen i 1 kap 9 § HL)

### *Kunskap och förståelse*

För masterexamen skall studenten

- visa kunskap och förståelse inom huvudområdet för utbildningen, inbegripet såväl brett kunnande inom området som väsentligt fördjupade kunskaper inom vissa delar av området samt fördjupad insikt i aktuellt forsknings- och utvecklingsarbete, och
- visa fördjupad metodkunskap inom huvudområdet för utbildningen.

### *Färdighet och förmåga*

För masterexamen skall studenten

- visa förmåga att kritiskt och systematiskt integrera kunskap och att analysera, bedöma och hantera komplexa företeelser, frågeställningar och situationer även med begränsad information,
- visa förmåga att kritiskt, självständigt och kreativt identifiera och formulera frågeställningar, att planera och med adekvata metoder genomföra kvalificerade uppgifter inom givna tidsramar och därigenom bidra till kunskapsutvecklingen samt att utvärdera detta arbete,
- visa förmåga att i såväl nationella som internationella sammanhang muntligt och skriftligt klart redogöra för och diskutera sina slutsatser och den kunskap och de argument som ligger till grund för dessa i dialog med olika grupper, och
- visa sådan färdighet som fordras för att delta i forsknings- och utvecklingsarbete eller för att självständigt arbeta i annan kvalificerad verksamhet.

### *Värderingsförmåga och förhållningssätt*

För masterexamen skall studenten

- visa förmåga att inom huvudområdet för utbildningen göra bedömningar med hänsyn till relevanta vetenskapliga, samhälleliga och etiska aspekter samt visa medvetenhet om etiska aspekter på forsknings- och utvecklingsarbete,
- visa insikt om vetenskapens möjligheter och begränsningar, dess roll i samhället och människors ansvar för hur den används, och
- visa förmåga att identifiera sitt behov av ytterligare kunskap och att ta ansvar för sin kunskapsutveckling.

(bilaga 2, högskoleförordningen [HF])

*Utöver detta har Örebro universitet som mål att den studerande efter avslutad utbildning skall kunna:*

– visa kunskaper och färdigheter inom teoretisk kemi, datormodellering och närliggande områden.

### **3 UTBILDNINGEN**

#### **3.1 Utbildningens huvudsakliga uppläggning och innehåll**

Programmets första år är av nationell karaktär och ägnas framför allt till att uppnå en god grund i 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 internationell karaktär och studenten tillägnar sig en solid grund i avancerad teoretisk kemi och datormodellering samt tillämpningar inom de viktigaste områdena i modern kemi, materialvetenskap och biologi. Året inleds med kursen Avancerad teoretisk kemi och datormodellering, 21 högskolepoäng, vilken består av en 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), vilket genomförs vid ett av de övriga deltagande lärosätena.

#### **3.2 Kurser som ingår i programmet**

Flera olika kombinationer av kurser är tänkbara inom ramen för programmets första år, beroende på studenternas tidigare bakgrund. Nedan anges två studiegångar, en för studenter med en kandidatexamen i kemi, en annan för studenter med en kandidatexamen i fysik/materialvetenskap. Möjligheten finns att efter första året ta ut en magisterexamen med kemi som huvudområde.

#### ***År 1 - Valbara kurser för studenter med en kandidatexamen i kemi***

##### *Kurser på grundnivå:*

Studenter som avser att avsluta utbildningen med en magisterexamen kan maximalt välja kurser om 15 högskolepoäng på grundnivå. De studenter som avser att avsluta utbildningen med en masterexamen kan maximalt välja kurser om 30 högskolepoäng på grundnivå.

*- Matematik A, Linjär algebra L1, 7,5 högskolepoäng*

Kursen ger grundläggande kunskaper och färdigheter om linjära ekvationssystem, matriser, determinanter samt vektorer i planet och rummet.

*- Matematik A, Analys A1, 7,5 högskolepoäng*

Kursen ger grundläggande kunskaper och färdigheter i differentialkalkyl i en variabel.

*- Matematik A, Analys A2, 7,5 högskolepoäng*

Kursen ger grundläggande kunskaper och färdigheter inom områdena intergralkalkyl i en variabel och ordinära differentialekvationer.

*- Matematik B, Numeriska metoder, 7,5 högskolepoäng*

Kursen ger kunskaper om olika numeriska metoder för lösning av matematiska problem som ofta uppträder i naturvetenskap och teknik. Vidare ges träning i användande av matematisk programvara och i utveckling av större beräkningsprogram. Kursen ges vid Mälardalens högskola.

*- Matematik B, Matematisk statistik, 7,5 högskolepoäng*

Kursen ger kunskaper om sannolikhetslära och statistisk teori.

*- Fysik A, Termodynamik och statistisk fysik, 7,5 högskolepoäng*

Kursen behandlar termodynamiska system, tillståndsekvationer, reversibla och icke-reversibla processer, termodynamikens lagar, värme och arbete, värmekapacitet och fasövergångar.

*- Fysik B, Kvantmekanik, 7,5 högskolepoäng*

Kursen behandlar vågfunktioner och sannolikhetsstäthet samt Schrödingerekvationen. Vidare beskrivs sambandet mellan mätbara storheter och operatorer. Teorin tillämpas på tvåatomiga molekylers rotations- och vibrationsrörelse samt växelkännande atomer.

*- Fysik C, Fasta tillståndets fysik, 7,5 högskolepoäng*

Kurser behandlar kristallstruktur, värmekapacitet, elektrisk konduktivitet och värmeledning, bandteori och halvledare.

*Kurser på avancerad nivå:*

Studenter som avser att avsluta utbildningen med en magisterexamen måste minst läsa kurser om 45 högskolepoäng på avancerad nivå varav ett självständigt arbete om 15 högskolepoäng.

*- Kemi, avancerad nivå, Teoretisk kemi breddning, 30 högskolepoäng*

Kursen utgör en plattform om 30 högskolepoäng för olika verktygskurser inom områdena kemi, fysik och matematik. Kursen innehåller delkurser inom t.ex. linjär algebra, analys A1 och A2, matematisk statistik, termodynamik och statistisk fysik, kvantmekanik, fasta tillståndets fysik, allmän kemi, fysikalisk kemi och biokemi.

*- Kemi, avancerad nivå, Biokemisk modellering, 15 högskolepoäng*

Kursen behandlar teorier bakom användning och beskrivning av såväl molekylär struktur och växelverkan som spektroskopiska observationer. Därtill baseras kursen på datormodellering av egenskaper och processer i biokemiska system, såsom enzymkatalys, diffusionsprocesser samt modellering av läkemedels egenskaper och reaktioner. Obligatorisk kurs för studenter som avser att avsluta utbildningen med en masterexamen.

*- Kemi, avancerad nivå, Molekylär fotokemi, 7,5 högskolepoäng*

Kursen ger förståelse för materians egenskaper samt hur denna växelverkar med strålning för olika kemiska reaktioner. Fokus ligger på isolerade små molekyler och en teoretisk-mekanistisk beskrivning av spektroskopiska övergångar, de regler

som styr vilka reaktioner som är tillåtna eller förbjudna, och innefattar såväl omlagringar som additions- och sönderdelningsreaktioner. Kursen är av vikt bl.a. för att förstå mekanismer för studier av fotokemiska läkemedel och skadeprocesser som uppkommer av UV-strålning.

- *Kemi, avancerad nivå, Introduktion till PERL, 7,5 högskolepoäng*  
Kursen ger förståelse för hur programmeringsspråket PERL är uppbyggt, och hur det används för att skriva kortare program samt för att extrahera relevant information ur stora mängder data, t.ex. resultatfiler från teoretisk-kemiska beräkningar. Kursen består i huvudsak av självstudier med regelbundna diskussionsmöten, samt övningsuppgifter.

- *Kemi, avancerad nivå, Självständigt arbete, 15 högskolepoäng*  
Kursen ger fördjupade kunskaper inom kemi med utgångspunkt från en relevant problemformulering i samverkan med en utsedd handledare. Genom det självständiga arbetet uppnås kunskaper och färdigheter inom informationssökning, resultatbearbetning och vetenskaplig rapportering. Kursen är obligatorisk för de studenter som väljer att avsluta utbildningen med en magisterexamen.

### ***År 1 - Valbara kurser för studenter med en kandidatexamen i fysik eller materialvetenskap***

#### *Kurser på grundnivå:*

Studenter som avser att avsluta utbildningen med en magisterexamen kan maximalt välja kurser om 15 högskolepoäng på grundnivå. De studenter som avser att avsluta utbildningen med en masterexamen kan maximalt välja kurser om 30 högskolepoäng på grundnivå.

- *Kemi A, 30 högskolepoäng*  
Kursen ger, såväl i teori som i praktik, relevanta kemiska kunskaper och färdigheter inom allmän kemi, organisk kemi samt biokemi.

- *Kemi B, Allmän kemi II, 7,5 högskolepoäng*  
Kursen ger kunskaper och färdigheter kring bl.a. atomspektra och atomers elektronkonfiguration, atom- och molekylorbitaler, kemisk bindning samt intermolekylära krafter.

- *Kemi B, Fysikalisk kemi, 7,5 högskolepoäng*  
Kursen ger kunskaper och färdigheter kring bl.a. olika tillstånd, termodynamik, kinetik, kvantteori samt spektroskopi.

*Kurser på avancerad nivå är de samma som för studenter med en kandidatexamen i kemi.*

### **År 2 – gemensamma kurser för samtliga studenter**

*Kemi, avancerad nivå, Avancerad teoretisk kemi och datormodellering, 21 högskolepoäng.*

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. Kursen ges på engelska.

*Kemi, avancerad nivå, Tillämpad modellering, 3 högskolepoäng.*

Kursen är exempelbaserad och ger djuplodande kunskaper och färdigheter inom avancerad tillämpad datormodellering. Kursen ges på engelska.

*Kemi, avancerad nivå, Självtändigt arbete, 36 högskolepoäng.*

Kursen ger avancerade kunskaper inom kemi med utgångspunkt från en relevant problemformulering i samverkan med en utsedd handledare. Genom det självständiga arbetet uppnås kunskaper och färdigheter inom informationssökning, försöksupplägg och tidsplanering, resultatbearbetning och vetenskaplig rapportering. Studenten väljer själv och utför minst 24 högskolepoäng vid ett av de deltagande universiteterna. Arbetet avslutas med muntlig och skriftlig redovisning på engelska vid hemuniversitetet.

### **3.3 Studieformer**

Undervisningen bedrivs huvudsakligen i form av föreläsningar, laborationer, lektioner och självstudier. Därtill förekommer även grupp- och projektarbeten. Studierna är utformade för att stimulera det kritiska reflekterandet, förmågan att söka och värdera information, förmågan att självständigt följa kunskapsutvecklingen samt förmågan att kommunicera muntligt och skriftligt. För närmare information om studieformer, se respektive kursplan.

## **4 INTERNATIONELLT STUDENTUTBYTE**

Programmet är ett europeiskt samarbete mellan ett fyrtiotal universitet. Den internationella kursen Kemi, avancerad nivå, Avancerad teoretisk kemi och datormodellering, arrangeras på olika platser i Europa. Projektarbetet omfattande drygt en termins studier, genomförs vid något av de andra deltagande universiteterna.

## **5 BETYG OCH EXAMINATION**

Om inte annat är föreskrivet i kursplanen skall, enligt 6 kap. 18 § högskoleförordningen (HF), betyg sättas på en genomgången kurs. Betyget skall bestämmas av en av högskolan särskilt utsedd lärare (examinator).

Som betyg skall, enligt 6 kap. 19 § HF, användas något av uttrycken underkänd, godkänd eller väl godkänd, om inte högskolan föreskriver annat betygssystem.

Rektor har beslutat att alla institutioner som har utbytesstudenter studerande vid sin institution skall rapportera betyg såväl enligt den svenska betygsskalan som ECTS-betygsskala (Rektors beslut nr 26/2002, Dnr 42-2002).

I de fall rektor medgivit avsteg från den tregradiga betygsskalan framgår detta av respektive kursplan.

Obligatoriska moment förekommer bland annat i form av laborationer och övningar i de individuella kurserna. För närmare reglering av eventuell obligatoriska moment hänvisas till respektive kursplan.

För ytterligare information, se lokala riktlinjer för examination.

För de kurser som annat lärosäte har kursansvar för ges betyg enligt nationella och lokala regler vid respektive lärosäte.

## **6 EXAMEN**

Utbildningen ger möjlighet till följande examina:

### ***Naturvetenskaplig magisterexamen (Degree of Master [One Year] of Science)***

En naturvetenskaplig magisterexamen uppnås efter att studenten, utöver examen på grundnivå, fullgjort kursfordringar om 60 högskolepoäng, varav

- minst 45 högskolepoäng på avancerad nivå, varav
  - minst 30 högskolepoäng med fördjupning inom ett naturvetenskapligt huvudområde,
  - ett självständigt arbete (examensarbete) om minst 15 högskolepoäng inom ramen för huvudområdet,
- minst 15 högskolepoäng inom annat naturvetenskapligt huvudområde/andra naturvetenskapliga huvudområden, om inte tidigare erhållen examen innehåller detta.

### ***Naturvetenskaplig masterexamen (Degree of Master [Two Year] of Science)***

En naturvetenskaplig masterexamen uppnås efter att studenten, utöver examen på grundnivå, fullgjort kursfordringar om 120 högskolepoäng, varav

- minst 90 högskolepoäng på avancerad nivå, varav
  - minst 60 högskolepoäng med fördjupning inom ett naturvetenskapligt huvudområde,
  - ett självständigt arbete (examensarbete) om minst 30 högskolepoäng inom ramen för huvudområdet,
- minst 30 högskolepoäng inom annat naturvetenskapligt huvudområde/andra naturvetenskapliga huvudområden, om inte tidigare erhållen examen innehåller detta.

Mål, se punkt 2.2.

För ytterligare information, se lokala riktlinjer för examina.

## **7 BEHÖRIGHETSVILLKOR**

### **7.1 Behörighetsvillkor vid antagning till programmet**

För att vara behörig till programmet krävs att den sökande har avlagt examen om minst 180 högskolepoäng varav minst 90 högskolepoäng i kemi (inklusive materialvetenskap) eller fysik, eller motsvarande utländska examen.

För ytterligare information, se Antagningsordningen.

## **7.2 Behörighetsvillkor vid antagning till kurser inom programmet**

För att bli antagen till kurser inom programmet krävs att den studerande har den särskilda behörighet som föreskrivs. För att få påbörja kursen Kemi, avancerad nivå, Avancerad teoretisk kemi och datormodellering, 21 högskolepoäng, krävs betyget godkänt på kursen Kemi, avancerad nivå, Biokemisk modellering, 15 högskolepoäng, eller motsvarande kurs. Den särskilda behörigheten framgår av respektive kursplan.

## **8 URVAL OCH PLATSGARANTI**

### **8.1 Urval till programmet**

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

### **8.2 Platsgaranti inom programmet**

Utöver programmets kurser, har studerande inom ramen för valfria kurser platsgaranti till universitetets samtliga kurser (dock högst 30 högskolepoäng per termin) där den studerande uppfyller kraven för den särskilda behörigheten. Kurser kan undantas från platsgarantin, se Antagningsordningen.

## **9 TILLGODORÄKNANDE AV TIDIGARE UTBILDNING**

Beslut om tillgodoräknande för erhållande av betyg på kurs fattas av examinator för den aktuella kursen (6 kap. 18 § 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 lokala riktlinjer för tillgodoräknanden.

För de kurser som annat lärosäte har kursansvar för sker tillgodoräknande enligt nationella och lokala regler vid respektive lärosäte.

## **10 ÖVRIGT**

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

Kursen Avancerad teoretisk kemi och datormodellering samt det självständiga arbetet genomförs på engelska.



---

**IKRAFTTRÄDANDE- OCH ÖVERGÅNGSBESTÄMMELSER (6 KAP. 17 § HF)**

Denna utbildningsplan gäller från och med höstterminen 2007.

De som påbörjade utbildningen höstterminen 2006 har rätt att slutföra utbildningen i enlighet med den utbildningsplan som fastställdes februari 2005 till och med vårterminen 2009.