



ÖREBRO UNIVERSITET

AKADEMIN FÖR NATURVETENSKAP OCH
TEKNIK

Utbildningsplan

Dnr CF 52-616/2008

Sida 1 (7)

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 24 november 2008 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. 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, samhällsliga 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 läses kurser inriktade på olika aspekter av beräkningskemi samt vissa avancerade aspekter inom kemins olika områden. En god bakgrund inom grundläggande matematik, statistisk mekanik, molekylär kvantmekanik, programmering och numeriska metoder samt grundläggande spektroskopi är av vikt.

Utbildningens andra år har en markerat internationell karaktär och ger under den inledande delen en fördjupning i avancerad teoretisk kemi och datormodellering samt tillämpningar inom de viktigaste områdena i modern kemi, materialvetenskap och biologi. Det inleds med kursen Avancerad teoretisk kemi och datamodellering, 21 högskolepoäng, vilken består av en fyra veckor lång 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 avancerad nivå), vilket genomförs vid ett av de övriga deltagande lärosätena.

3.2 Kurser som ingår i programmet

Nedan anges en rekommenderad studiegång för utbildningens första år. Flera olika kombinationer av kurser är tänkbare beroende på studenternas tidigare bakgrund. Möjligheten finns att efter första året ta ut en magisterexamen med kemi som huvudområde.

År 1 - rekommenderad studiegång

Kemi, avancerad nivå, Molekylär kvantkemi I, 15 högskolepoäng

I denna kurs ligger fokus på Hartree-Fock-metoden samt korrelerade elektroniska strukturberäkningar.

Kemi, avancerad nivå, Biokemisk modellering, 15 högskolepoäng

Kursen behandlar 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 kvantkemi II, 15 högskolepoäng

Fokus i denna kurs ligger på Täthetsfunktionalteori.

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

Kursen ger förståelse för materialets 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, Multiskal-modellering, 7,5 högskolepoäng

I denna kurs fokuseras på metoder för att länka samman simuleringar i olika storleksordningar.

Kemi, avancerad nivå, Själständigt 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 informationsökning, resultatbearbetning och vetenskaplig rapportering. Kursen är obligatorisk för de studenter som väljer att avsluta utbildningen med en magisterexamen.

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. Kursen inleds i 'intensivform' under tre fyra 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, Själständigt 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 informationsökning, 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 universiteten.

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 (grundläggande behörighet för tillträde till utbildning på avancerad nivå, 7 kap 28 § HF), varav minst 90 högskolepoäng med successiv fördjupning i kemi (inklusive materialvetenskap) eller fysik samt kunskaper motsvarande Engelska kurs B från gymnasieskolan (särskild behörighet för tillträde till utbildning på avancerad nivå 7 kap 31 § HF).

Sökande som inte har Engelska kurs B eller motsvarande kunskaper, kan dokumentera sina kunskaper i engelska genom att bifoga resultat från ett internationellt erkänt test i det engelska språket.

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

Platserna på programmet fördelas proportionellt efter antalet behöriga sökanden med huvudområde kemi (inklusive materialvetenskap) eller fysik samt övriga sökanden. Inom respektive grupp rangordnas de behöriga sökande efter totalt antal högskolepoäng senast vid sista ansökningsdagen.

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 processchefen för Studentservice (se delegationer i utbildningsfrågor).

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

För ytterligare information, se lokala riktlinjer för tillgodoräkningen.

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.

Undervisningen genomförs på engelska.

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

Denna utbildningsplan gäller från och med höstterminen 2009.

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.

De som påbörjade utbildningen höstterminen 2008 har rätt att slutföra utbildningen i enlighet med den utbildningsplan som fastställdes mars 2007 till och med vårterminen 2011.