

Endringsrapport for emne KJM5630

Stadiuminfo:	Utkast (S1)
Sist endret:	17.02.2020 Christian Thorn (chrthorn)
Opprettet i EpN:	Nei

Gammel verdi (S0, Importert fra FS)

Ny verdi (S1, Utkast)

Generelt

Navn - bokmål	Molekylmodellering	Multiskala Molekylmodellering
Navn - engelsk	Molecular Modeling	Multi-scale Molecular Modeling

Rapportering

Ingen endringer

Undervisning

Ingen endringer

Emneinfo

Kort om emnet:

Engelsk:

The course is designed to give students in chemistry and related subjects an introduction to the theory for molecular modeling, and use of modeling as a **tool in chemical research** **fundamental conceptual approach in molecular-based research**. Considerable emphasis will be placed on practical use of modeling and an understanding of the methods which extends beyond purely operational skills. The aim is to give the students the sufficient background to independently evaluate choice of methods and reliability of results in molecular modeling.

Hva lærer du?:

Bokmål:

Når du har fullført dette emnet kan du

- **Forstå forstå** hvordan kvantemekaniske modeller kan tilpasses til å beskrive kjemiske reaksjoner og egenskaper.
- **Forklare forklare** styrker og svakheter ved ulike modeller (molekylmekanikk, semiempiriske, bølgefunksjonsbaserte og tetthetsfunksjonalteori).
- **Forklare forklare** hvordan kvantekjemien kan bidra til forståelse av reaksjonsmekanismer i organisk kjemi og katalyse
- Vurdere nøyaktigheten av utførte beregninger.

- Presentere resultater fra beregningstudier skriftlig og muntlig.

Engelsk:

When you have completed this course, you can

- understand the theoretical connection between statistical and quantum mechanics, and computer modelling
- understand how macroscopic thermodynamic quantities, including endo/exoergonic processes or reaction rates, can be derived from microscopic mechanical properties
- understand how molecular models at different scales and resolutions Understand how quantum mechanical models can be used to describe different (bio)chemical reactions and properties.and (bio)physical phenomena
- master the fundamental algorithms used in molecular modelling, including molecular dynamics, Monte Carlo, and advanced enhanced sampling techniques
- explain Explain strengths and weaknesses of different models (including ab initio, molecular mechanics, semi-empirical, wavefunction based and density functional theoryQM/MM, coarse grained).
- Explain how quantum mechanics can contribute to the understanding of reaction mechanisms in organic chemistry and catalysis.
- Evaluate the evaluate the accuracy of performed calculations
- Present present results from computational studies in both oral and written formform

Opptak til emnet:

Bokmål:

Studenter med studierett på program må hvert semester søke og få plass på undervisningen og melde seg til eksamen i Studentweb.

Studenter tatt opp til andre masterprogrammer, kan etter søknad få adgang til emnet hvis dette er klarert med eget program.

Dersom du ikke allerede har studie plass ved UiO, kan du søke om opptak til våre studieprogrammer.

Engelsk:

Students who are admitted to study programmes at UiO must each semester register which courses and exams they wish to sign up for in Studentweb.

Students enrolled in other Master's Degree Programmes can, on application, be admitted to the course if this is cleared by their own study programme.

If you are not already enrolled as a student at UiO, please see our information about admission requirements and procedures.

Obligatoriske forkunnskaper:

Ingen endringer

Anbefalte forkunnskaper:

Engelsk:

emne: KJM2600. A minimum in mathematics corresponding to emne:MAT1001, KJM3300 (new Physical Chemistry III), MAT1050, MAT1060, IN-KJM1900, or equivalent courses

Overlappende emner:

Bokmål:

10 studiepoeng mot emne: KJM3600, 10 studiepoeng mot emne: KJM4600, 10 studiepoeng mot emne: KJM9630

Engelsk:

10 study points against emne: KJM3600, 10 study points against emne: KJM4600, 10 study points against emne: KJM9630 KJM9630

This course is a revised version of old KJM5630, estimate overlap: 3 study points

Undervisning:

Bokmål:

Emnet omfatter 30 timer forelesninger og 32 timer datalab (Åtte åtte øvelser). For å gå opp til eksamen, må eksamen må du ha fått godkjent samtlige åtte rapporter. En av øvelsene skal du i tillegg presentere muntlig. Presentasjonen må være godkjent. Tre av rapportene teller til sammen 50% av avsluttende vurdering. Du får beskjed i starten av semesteret hvilke rapporter som teller med i vurderingen.

Det er obligatorisk oppmøte til første forelesning og første gruppetime. Du mister plassen på emnet dersom gyldig forfall til første forelesning/gruppetime ikke er meldt til Kjemisk institutts ekspedisjonskontor, tlf. 22 85 54 46 eller ekspedisjonen@kjemi.uio.no, institutt, før forelesningen/gruppen starter.

Engelsk:

The course consists of 30 hours of lectures and 32 hours of computer computer lab (eight sessions). To take the exam, all eight reports must be approved. You also have to give an oral presentation of one of the eight practical exercises. The presentation has to be approved. Three of the reports count 50 % in all of the final evaluation. You will be informed in the at the beginning of the semester which reports influence your final grade. Approved exercises are only valid the semester they are written.

The first lecture/group exercise is mandatory. If you are unable to join, the Expedition Office has to be informed in advance (phone 22 85 54 46, or e-mail ekspedisjonen@kjemi.uio.no). you must notify the student administration at the Department of Chemistry before the first lecture/group exercise starts. If you fail to register as an active student for the course in either of these ways, you will lose the access to the course for the given semester.

Eksamen:

Ingen endringer

Hjelpemidler til eksamen:

Ingen endringer

Eksamensspråk:

Engelsk:

The examination text is given in English, and you **must** submit your response in English.

Karakterskala:

Ingen endringer

Adgang til ny eller utsatt eksamen:

Ingen endringer

Kursavgift:

Ingen endringer

Kostnader ved å ta emnet:

Ingen endringer

Undervisningssemester:

Ingen endringer