



Fakulteten för hälsa, natur- och teknikvetenskap
Kemi

Kursplan

Kemins beräkningsmetoder

Kurskod: KEGA51
Kursens benämning: Kemins beräkningsmetoder
Chemistry calculation methods
Högskolepoäng: 7.5
Utbildningsnivå: Grundnivå
Successiv fördjupning: Grundnivå, har mindre än 60 hp kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav (G1F)

Huvudområde:
KEA (Kemi)
MAA (Matematik/tillämpad matematik)

Beslut om fastställande

Kursplanen är fastställd av Fakulteten för hälsa, natur- och teknikvetenskap 2022-01-31 och gäller från höstterminen 2022 vid Karlstads universitet.

Behörighetskrav

Varit registrerad på 60 hp kemi varav 30 hp godkända. Matematik 4.
Motsvarandebedömning kan göras.

Lärandemål

Kursens syfte är att studenten ska tillägna sig grundläggande kunskaper och färdigheter inom kemins beräkningsmetoder.

Efter avklarad kurs ska studenten kunna

1. beskriva betydelsen av de matematiska begreppen derivata, differentialekvation och integral för valda kemiska system,
2. använda grundläggande matematiska begrepp inom kemisk kinetik,
3. använda differentialekvationer för valda kemiska system,

4. tillämpa matrisalgebra för lösning av linjära ekvationssystem inom stökiometri, kinetik och spektroskopi,
5. tillämpa polära koordinater och komplexa tal inom kvantkemi,
6. förklara och använda vektoranalys för att beskriva dipolmoment, krafter och flöden,
7. relatera gränsvärden och asymptoter till kemiska system,
8. beskriva och använda grundläggande statistik, feluppskattningar och regressionsanalys för kemiska problemställningar,
9. använda datorbaserade metoder för att lösa kemiska problemställningar,
10. redogöra för och använda grafiska metoder för att lösa kemiska problemställningar samt
11. diskutera matematiska begrepp ur ett kemiskt perspektiv.

Innehåll

Undervisningen sker i form av föreläsningar, övningar och seminarier. Vissa avsnitt förväntas studenten tillgodogöra sig på egen hand, varför det är viktigt att studenten kan tillgodogöra sig engelskspråkig kurslitteratur.

Kursen består av moment som fokuserar på kemisk kinetik, kemiska reaktioner, kvantkemi, spektroskopi, molekylär beskrivning, statistik och grafiska metoder. Dessa delar undervisas integrerat och parallellt. Inom ramen för dessa moment tas följande matematiska begrepp och metoder upp:

- derivatans definition och räkneregler, elementära funktioners derivator och implicit derivering,
- växande och avtagande funktioner, extrempunkter, asymptoter och gränsvärden,
- primitiva funktioner, partiell integrering och integrering av elementära funktioner,
- ordinära differentialekvationer för att beskriva nollte, första och andra ordningens kinetik samt kopplade processer,
- polära koordinater, komplexa tal, linjära ekvationssystem och matrisalgebra,
- datorbaserade metoder för att lösa linjära ekvationssystem,
- grafiska metoder, både manuella och datorbaserade samt
- grundläggande statistik, väntevärde, varians, sannolikhet, osäkerhet, noggrannhet, felfortplantning och signifikans.

De matematiska begreppen och metoderna kopplas till beräkningsmetoder för kemiska system.

Kurslitteratur och övriga läromedel

Se separat dokument.

Examination

Examination av kursens mål sker dels via individuella inlämningsuppgifter, dels via individuella muntliga presentationer på seminarier.

Om studenten har ett beslut från Karlstads universitet om riktat pedagogiskt stöd på grund av dokumenterad funktionsnedsättning har examinator rätt att ge studenten en anpassad examination eller att låta studenten genomföra examinationen på ett alternativt sätt.

Betyg

Kursen bedöms enligt betygsskalan Väl godkänd (VG), Godkänd (G) eller Underkänd (U).

Kvalitetsuppföljning

Under och efter kursen sker en uppföljning av måluppfyllelse och förutsättningar för lärande i kursen. Dess främsta syfte är att bidra till förbättringar. Studenternas erfarenheter och synpunkter är ett av underlagen för granskningen, och inhämtas i enlighet med gällande regelverk. Studenterna informeras om resultaten och eventuella beslut om åtgärder.

Kursbevis

Kursbevis utfärdas på begäran.

Övrigt

Gällande regler för utbildning på grundnivå och avancerad nivå vid Karlstads universitet reglerar studenters och anställdas skyldigheter och rättigheter.