



NATUR-
VETENSKAPLIGA
FAKULTETEN

STUDIEPLAN

Diarienummer
U 2024/66

Datum 2024-02-14

Fakultetsstyrelsen

Allmän studieplan för forskarutbildning i ämnet beräkningskemi, NAKEMT02

Studieplanen är fastställd av fakultetsstyrelsen 2024-02-14. Den ersätter NAKEMT01 och gäller för forskarstuderande antagna från och med 2024-02-15.

Studieplanen bygger på Högskoleförordningens (1993:100) 6 kap. §§ 1–11, 25–36, 7 kap. §§ 34–41 och bilaga 2 som är examensordningen.

1. Möjliga examina

Studier enligt denna allmänna studieplan kan leda till någon av följande examina:

Filosofie doktorexamen i beräkningskemi / *Doctor of Philosophy in Computational Chemistry*.

Filosofie licentiatexamen i beräkningskemi / *Licentiate of Philosophy in Computational Chemistry*.

Fakultetsstyrelsen har i samråd med LTH beslutat (NA35 643/2005) att den som antagits till forskarutbildning inom naturvetenskaplig fakultet med civilingenjörsexamen som behörighetsgrund, kan ges beteckningen teknologie doktor eller teknologie licentiat utan särskild prövning.

2. Ämnesbeskrivning

Inom många vetenskapsområden har beräkningar blivit en så viktig del av forskningen att det utvecklats till en egen gren inom området, till exempel beräkningskemi inom kemi.

Beräkningsvetenskap är ett samlingsbegrepp för sådana aktiviteter inom olika ämnen.

Beräkningsvetenskap är i sin vidaste mening forskning som använder eller utvecklar digitala verktyg för avancerade beräkningar eller hantering av data. Sådana aktiviteter kan vara simulering och modellering så väl som analys och administrering av forskningsdata. Det omfattar även utveckling av modeller metoder, mjukvara, stödfunktioner, ramverk och databaser. Denna breda definition täcks också av begreppet e-vetenskap.

Forskning inom beräkningskemi innebär utvecklande av och/eller tillämpandet av kvantkemiska och statistisk-mekaniska beräkningsmetoder för att beskriva kemiska system och processer. Dessa metoder tillämpas för att lösa eller belysa frågeställningar inom framförallt ytkemi, polymerkemi, biokemi, materialkemi, intermolekylär växelverkan och spektroskopi.

3. Syfte och mål för forskarutbildningen

Utbildning på forskarnivå ska väsentligen bygga på de kunskaper som studenterna får inom utbildning på grundnivå och avancerad nivå eller motsvarande kunskaper. Utbildning på forskarnivå ska, utöver vad som gäller för utbildning på grundnivå och på avancerad nivå, särskilt utveckla de kunskaper och färdigheter som behövs för att självständigt kunna bedriva forskning. Det är även önskvärt att doktoranden kan förvärva pedagogisk erfarenhet.

De övergripande målen för forskarutbildningen är definierade i Högskoleförordningens bilaga 2, Examensordningen.

3.1. Mål för doktorsexamen

Kunskap och förståelse

För doktorsexamen ska doktoranden

- visa brett kunnande inom och en systematisk förståelse av forskningsområdet samt djup och aktuell specialistkunskap inom en avgränsad del av forskningsområdet, och
- visa förtrogenhet med vetenskaplig metodik i allmänhet och med det specifika forskningsområdets metoder i synnerhet.

Färdighet och förmåga

För doktorsexamen ska doktoranden

- visa förmåga till vetenskaplig analys och syntes samt till självständig kritisk granskning och bedömning av nya och komplexa företeelser, frågeställningar och situationer,
- visa förmåga att kritiskt, självständigt, kreativt och med vetenskaplig noggrannhet identifiera och formulera frågeställningar samt att planera och med adekvata metoder bedriva forskning och andra kvalificerade uppgifter inom givna tidsramar och att granska och värdera sådant arbete,
- med en avhandling visa sin förmåga att genom egen forskning väsentligt bidra till kunskapsutvecklingen,
- visa förmåga att i såväl nationella som internationella sammanhang muntligt och skriftligt med auktoritet presentera och diskutera forskning och forskningsresultat i dialog med vetenskapssamhället och samhället i övrigt,
- visa förmåga att identifiera behov av ytterligare kunskap, och
- visa förutsättningar för att såväl inom forskning och utbildning som i andra kvalificerade professionella sammanhang bidra till samhällets utveckling och stödja andras lärande.

Värderingsförmåga och förhållningssätt

För doktorsexamen ska doktoranden

- visa intellektuell självständighet och vetenskaplig redlighet samt förmåga att göra forskningsetiska bedömningar, och
- visa fördjupad insikt om vetenskapens möjligheter och begränsningar, dess roll i samhället och människors ansvar för hur den används.

3.2. Mål för licentiatexamen***Kunskap och förståelse***

För licentiatexamen ska doktoranden

- visa kunskap och förståelse inom forskningsområdet, inbegripet aktuell specialistkunskap inom en avgränsad del av detta samt fördjupad kunskap i vetenskaplig metodik i allmänhet och det specifika forskningsområdets metoder i synnerhet.

Färdighet och förmåga

För licentiatexamen ska doktoranden

- visa förmåga att kritiskt, självständigt och kreativt och med vetenskaplig noggrannhet identifiera och formulera frågeställningar, att planera och med adekvata metoder genomföra ett begränsat forskningsarbete och andra 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 presentera och diskutera forskning och forskningsresultat i dialog med vetenskapssamhället och samhället i övrigt, och
- visa sådan färdighet som fordras för att självständigt delta i forsknings- och utvecklingsarbete och för att självständigt arbeta i annan kvalificerad verksamhet.

Värderingsförmåga och förhållningssätt

För licentiatexamen ska doktoranden

- visa förmåga att göra forskningsetiska bedömningar i sin egen forskning,
- 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.

4. Behörighet

För att bli antagen till utbildning på forskarnivå krävs att den sökande har grundläggande och särskild behörighet och att sökanden bedöms ha sådan förmåga i övrigt som behövs för att tillgodogöra sig utbildningen.

Grundläggande behörighet

Grundläggande behörighet att antas till utbildning på forskarnivå har den som har

1. avlagt en examen på avancerad nivå, eller
2. fullgjort kursfordringar om minst 240 högskolepoäng, varav minst 60 högskolepoäng på avancerad nivå, eller

3. på något annat sätt inom eller utom landet förvärvat i huvudsak motsvarande kunskaper.

Prefekt kan för en enskild sökande medge undantag från kravet på grundläggande behörighet, om det finns särskilda skäl.

Särskild behörighet

Minst 120 högskolepoäng ska utgöras av kemikurser varav minst 30 högskolepoäng examensarbete på avancerad nivå inom den valda inriktningen eller närbesläktade inriktningar.

I vissa fall kan kravet om kemikurser ersättas med andra ämnen. För beräkningskemi godkänns även 60 högskolepoäng fysik och 60 högskolepoäng matematik. Den särskilda behörigheten kan också ha erhållits genom annan motsvarande utbildning, vilket prövas i varje enskilt fall.

5. Urval

Urval bland sökande som uppfyller kraven ska göras med hänsyn till deras förmåga att tillgodogöra sig utbildningen. Enbart det förhållandet att en sökande bedöms kunna få tidigare utbildning eller yrkesverksamhet tillgodoräknad för utbildningen får dock inte vid urval ge sökanden företräde framför andra sökande.

Följande urvalsprinciper tillämpas:

Uppnådda studieresultat på kurser på grundnivå och avancerad nivå eller motsvarande nivå. Bredd, djup och relevans från kurser på grundnivå och avancerad nivå eller motsvarande nivå. Kvalitet på examensarbetet och på andra självständiga arbeten.

Övriga kunskaper eller färdigheter som är relevanta för den valda forskningsinriktningen.

Sökande som framstår som väl lämpade bör, när så är möjligt, genomgå en intervju.

Vid rekrytering och urval av studerande till utbildning på forskarnivå ska mångfald och jämn könsfördelning alltid beaktas i enlighet med Lunds universitets jämställdhetspolicy, likabehandlingspolicy och mångfaldsplan. Underrepresenterat kön ska ges förtur vid i övrigt likvärdiga meriter, om inte särskilda skäl talar däremot.

Det ska dessutom finnas en samstämmighet mellan studentens forskningsintressen och institutionens möjlighet att ge kompetent handledning.

6. Examenskrav

Utbildningen på forskarnivå avslutas med doktorsexamen eller, om den forskarstuderande så vill eller om så har angivits i antagningsbeslutet, med licentiatexamen. Doktoranden har också rätt men inte skyldighet att avlägga licentiatexamen som en etapp i utbildningen mot doktorsexamen.

Doktorsexamen omfattar 240 högskolepoäng medan licentiatexamen omfattar 120 högskolepoäng.

6.1. Avhandling/upsats

I utbildningen ska ingå ett vetenskapligt arbete dokumenterat i en doktorsavhandling eller i en licentiatupsats. Detta arbete ska försvaras vid en offentlig disputation (doktorsexamen) eller ett offentligt seminarium (licentiatexamen), i båda fallen med opponenter.

Doktorsavhandling

Avhandlingen ska omfatta minst 165 högskolepoäng.

Doktorsavhandlingen ska vara en genomtänkt och resonerande diskussion av det egna arbetet i relation till det större vetenskapsområdet och kan utformas antingen som en *sammanläggningsavhandling* eller som en *monografi*.

En sammanläggningsavhandling består av bilagda kopior av ett antal vetenskapliga artiklar eller manuskript samt en sammanfattningsdel (kappa). De vetenskapliga artiklarna ska vara av en kvalitet som motsvarar kraven för publicering i erkända vetenskapliga tidskrifter med granskningsförfarande och det ska i avhandlingen gå att särskilja doktorandens insatser i arbetena.

I en sammanläggningsavhandling är det sällan så, att de vetenskapliga uppsatserna är ensamförfattade av doktoranden. Därför ska vikt läggas vid kappan som å ena sidan ger doktoranden möjligheten att visa prov på en självständig och oberoende intellektuell prestation, å andra sidan gör det möjligt

att examinera doktorandens självständiga och oberoende insatser. Kappan ska vara en introduktion till uppsatserna och placera frågeställningar och uppnådda resultat i ett övergripande sammanhang. Kappan ska alltså vara skriven i en annan form än de i avhandlingen ingående uppsatserna och kunna läsas som en självständig vetenskaplig text. Kappan ska inte innehålla omfattande kopiering av text, figurer och tabeller från delarbetena.

Monografin utgörs av en sammanhängande rapport med redogörelse för forskningsuppgiften, frågeställningar, arbetsmetoder, analys, resultat och diskussion. För monografin gäller särskilt att den egna forskningen ska redovisas på ett sådant sätt att använda metoder och de uppkomna resultaten och slutsatserna kring dem kan förstås och bedömas.

Avhandlingen ska relatera till högskoleförordningens målformuleringar, vilket innebär att målet för sammanläggningsavhandlingen såväl som för monografin i huvudsak är att:

- visa på aktuell specialistkunskap samt en bred och djup förståelse av forskningsområdet.
- visa förmågan att sätta avhandlingsarbetet i ett större teoretiskt och vetenskapligt sammanhang.
- uttrycka tydliga mål med avhandlingsarbetet och dess viktigaste hypoteser och frågeställningar.
- visa på förtrogenhet med de metoder och analytiska verktyg som används inom forskningsområdet, samt att kunna bedöma och utvärdera dessa.
- visa på förmåga att reflektera kring den egna forskningens betydelse och begränsningar.
- väsentligen bidra till kunskapsutvecklingen inom fältet samt identifiera behov av ytterligare kunskap.

Avhandlingen ska innehålla en populärvetenskaplig sammanfattning, som kan skrivas på svenska eller engelska.

Licentiatuppsats

Uppsatsen ska omfatta minst 82,5 högskolepoäng.

Licentiatuppsatsen kan utformas antingen som en sammanfattning av minst en vetenskaplig artikel (eller

manuskript), som doktoranden har författat ensam eller gemensamt med andra personer, eller som ett enhetligt sammanhängande vetenskapligt verk (monografi). Den vetenskapliga uppsatsen ska vara av en kvalitet som motsvarar kraven för publicering i erkända vetenskapliga tidskrifter (med granskningsförfarande) och det ska gå att särskilja de olika författarnas insatser i de ingående arbetena. För detaljer beträffande sammanfattnings- respektive monografiuppsats, se sammanläggningsavhandling respektive monografi ovan.

6.2. Kurser och andra poänggivande moment

Inom ämnet beräkningskemi ska kurser eller andra poänggivande moment omfattande 60–75 högskolepoäng ingå för doktorsexamen och 30–37,5 högskolepoäng ingå för licentiatexamen. Den exakta omfattningen av poängkravet utöver avhandlingsarbetet ska framgå av den individuella studieplanen. Ämnesspecifika kurser inom beräkningskemi ska omfatta minst 30 högskolepoäng på doktorandnivå eller motsvarande för doktorsexamen, respektive 15 högskolepoäng för licentiatexamen.

Kurser eller andra poänggivande moment som ingår i utbildningen kan fullgöras såväl inom som utom Lunds universitet.

Obligatoriska kurser och andra poänggivande moment

- Introduktion vid institutionen (minst 1 hp)
- Fakultetsgemensam introduktionskurs för doktorander (0,5 hp)
- Arbetsmiljö, miljöhänsyn och risker (2 hp)
- Forskningsetik (3 hp)

Doktorander som undervisar ska genomgå grundläggande högskolepedagogisk utbildning motsvarande 3 hp.