



LUNDS UNIVERSITET
Lunds Tekniska Högskola

Kursplan för läsåret 2007/2008

BERÄKNINGSKEMI OCH STRUKTURANALYS KOK095

Computational Chemistry and Structure Analysis

Antal högskolepoäng: 7,5. **Betygskala:** TH. **Nivå:** G2 (Grundnivå, fördjupad).
Undervisningsspråk: Kursen ges på begäran på engelska. **Överlappar följande kurs/kurser:** KOK040 och KOK040. **Valfri för:** B41, K41. **Kursansvarig:** Prof. Ulf Berg, ulf.berg@organic.lu.se, Bioorganisk kemi. **Förkunskapskrav:** KOK012 Organisk kemi, allmän kurs. **Kan ställas in:** Vid mindre än 5 anmälda. **Prestationsbedömning:** För godkänd kurs med betyg 3 krävs godkänd inlämningsuppgift. För betygen 4 och 5 krävs ytterligare en respektive två godkända inlämningsuppgifter på svårare nivå. Ingen tentamen. **Hemsida:**
<http://www.organic.lu.se/Education/Kemiteknik/CompStruct/CompStruct.html>.

Syfte

Kursens syfte är att ge grundläggande kunskaper i att studera och bestämma organiska ämnens struktur.

Mål

Kunskap och förståelse

För godkänd kurs skall studenten

- beskriva vilken information som olika tekniker ger om organiska strukturer

Färdighet och förmåga

För godkänd kurs skall studenten

- kunna praktiskt, under handledning, tillämpa spektropiska metoder och utvärdera data
- kunna strukturbestämma enklare organiska föreningar utifrån spektroskopiska data
- med beräkningsmetoder kunna simulera organiska molekylers tredimensionella utseende
- i tal och skrift kunna diskutera organiska föreningars struktur

Innehåll

Metoder att beräkna molekylers tredimensionella utseende, konformationsanalys, laddningsfördelning samt reaktivitet behandlas. De teoretiska grunderna för spektroskopi behandlas, och utnyttjandet av framför allt NMR-spektroskopi och masspektrometri för att strukturbestämma organiska molekyler tränas även praktiskt. Styrkan i kombinationen av spektroskopi och datorstött konformationsanalys kommer att demonstreras. Deltagarna får mycket praktisk erfarenhet av de olika metoderna, och det

problembaserade inslaget i undervisningen är stort.

Litteratur

Pavia, Lampman, Kriz: Introduction to spectroscopy (3rd edition). Harcourt College
Publisher 2001. ISBN: 0-03-031961-7

eller

Williams, D H & Fleming, I; Spectroscopic methods in organic chemistry (5th
edition). ISBN: 0-07-709147-7.