

Kursplan för kalenderåret 2004

BERÄKNINGSKEMI OCH STRUKTURANALYS

KOK095

Computational Chemistry and Structure Analysis

Antal poäng: 5. **Betygskala:** TH. **Alternativobligatorisk för:**

B4Lä, K4L. **Kursansvarig:** Professor Olov Sterner, Bioorganisk kemi. **Förkunskapskrav:** KOK012 Organisk kemi AK.

Prestationsbedömning: Muntlig eller skriftlig tentamen.

Hemsida:

<http://www.bioorganic.lth.se/Teaching/CompStruct/CompStruct.html>.

Mål

Kursen presenterar moderna spektroskopiska metoder och andra tekniker som kan användas för att strukturbestämma lågmolekylära organiska ämnen. Dessutom presenteras datorbaserade metoder för beräkning av molekylers konformation och egenskaper.

Innehåll

Tyngdpunkten i den strukturanalytiska delen av kursen ligger på viktiga spektroskopiska metoder som NMR-spektroskopi och masspektrometri, men även utnyttjandet av t.ex. molekyلمekaniska beräkningar för att beskriva en molekyls tredimensionella utseende kommer att behandlas. Undervisningen består dels av föreläsningar, som behandlar den teoretiska bakgrunden för strukturanalys och dels av praktiskt inriktade övningar. Det problembaserade inslaget i undervisningen är stort och varje student kommer att på egen hand få lösa ett antal strukturer/beräkningar utifrån verkliga data som dels tillhandahålls och dels tas fram av eleven själv.

Litteratur

Pavia, D.L.; Lampman, G.M.; and Kriz, G.S.: Introduction to Spectroscopy. 3:e uppl. Harcourt College Publishing, 2001, ISBN 0-03-0319617. Kompendier.