



LUNDS UNIVERSITET
Lunds Tekniska Högskola

Kursplan för kalenderåret 2005

BERÄKNINGSKEMI OCH STRUKTURANALYS KOK095

Computational Chemistry and Structure Analysis

Antal poäng: 5. **Betygskala:** TH. **Alternativobligatorisk för:** B4XLä, K4XL.

Kursansvarig: Professor Olov Sterner, Bioorganisk kemi. **Förkunskapskrav:** KOK012

Organisk kemi, allmän kurs. **Prestationsbedömning:** Muntlig eller skriftlig tentamen.

Övrigt: Kursen kan komma att ställas in vid mindre än 5 anmälda. **Hemsida:**

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

Mål

Kursen presenterar moderna spektroskopiska metoder och tekniker som kan användas för att strukturbestämma lågmolekylära organiska ämnen. Dessutom presenteras beräkningskemiska metoder för beräkning av molekylers konformation och egenskaper. Målet är att den studerande självständigt ska kunna utföra strukturbestämnings av rimligt komplicerade organiska ämnen med tillgång till de tekniker som presenteras.

Innehåll

Tyngdpunkten i den strukturanalytiska delen av kursen ligger på viktiga spektroskopiska metoder som NMR-spektroskopi och masspektrometri, men även utnyttjandet av t.ex. molekylmekaniska 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.