



LUNDS
UNIVERSITET

Naturvetenskapliga fakulteten

KEMM30, Kemi: Molekylära drivkrafter och kemisk bindning, 15 högskolepoäng

*Chemistry: Molecular Driving Forces and Chemical Bonding, 15
credits*

Avancerad nivå / Second Cycle

Fastställande

Kursplanen är fastställd av Naturvetenskapliga fakultetens utbildningsnämnd 2018-11-23 och senast reviderad 2022-12-06. Den reviderade kursplanen gäller från och med 2022-12-06, höstterminen 2023.

Allmänna uppgifter

Kursen är en valbar kurs på avancerad nivå för en naturvetenskaplig masterexamen i kemi samt en obligatorisk kurs på avancerad nivå för en naturvetenskaplig masterexamen i tillämpad beräkningsvetenskap med inriktning kemi.

Undervisningsspråk: Engelska

Huvudområde

Tillämpad beräkningsvetenskap

Kemi

Fördjupning

A1N, Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

A1N, Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

Kursens mål

Kursen syftar till att studenterna ska tillägna sig en grundläggande ram för att beskriva (bio)molekyler och deras interaktioner ur ett grundläggande, mikroskopiskt perspektiv. Detta innefattar kvantkemi, statistisk termodynamik, intermolekylära växelverkan och spektroskopi. Studenten ska tillägna sig grundläggande aspekter av kemisk bindning, molekylära egenskaper och hur dessa relaterar till termodynamik, temperatur och interaktioner i lösning.

Studenten kommer att lära sig hur spektroskopi och modeller för intermolekylära interaktioner kan användas för att förstå grundläggande egenskaper hos biomolekyler, såsom proteiner, DNA och membran. Begrepp som hydrofoba växelverkan, kooperativ bindande, depletion-interaktioner, vätebindning, elektriska dubbelskikt kommer att behandlas.

För att hantera stora dataset, genererade antingen från experiment, simuleringar eller databassökningar, kommer studenten att skaffa sig grundläggande programmerings- och skriptkunskaper för att hantera, analysera och presentera komplexa data.

Kursens första del introducerar grundläggande programmerings- och skriptkunskaper, som kommer att användas under hela kursen. Detta inkluderar fallstudier som illustrerar realistiska scenarier där dataset importeras, analyseras och visualiseras. Exempel kan inkludera, men inte begränsas till: kinetik i biokemi och katalys, atomkraftsmikroskopi (AFM), elektrokemi, kalorimetri, optisk spektroskopi samt online databaser och litteraturhantering.

Kunskap och förståelse

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- förklara teorin för och tillämpningen av statistisk termodynamik
- beskriva hur (bio)molekyler, partiklar och joner interagerar
- förklara temperatur från ett mikroskopiskt perspektiv
- redogöra för de grundläggande principerna för vilken grundläggande optisk spektroskopi är uppbyggd, såsom övergångsdipolmoment och urvalsregler
- förklara och på avancerad nivå kvalitativt beskriva sambandet mellan spektroskopiska mätningar och molekylära egenskaper för elektroniska strukturegenskaper hos flera viktiga typer av molekyler och material
- förklara väsentliga aspekter av elektroniska processer i funktionella material, inklusive hur de relaterar till inneboende elektroniska strukturegenskaper
- förklara hur fysiska egenskaper och kemisk bindning kan förutsägas med hjälp av moderna elektroniska strukturberäkningar
- förklara påverkan av polära och icke-polära lösningsmedel vid partitionering, intermolekylära interaktioner, elektronisk struktur och solvatisering.

Färdighet och förmåga

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- importera, visualisera och tillämpa modeller till stora datamängder
- skapa interaktiva rapporter som innehåller färdiga publikationer, avancerad dataanalys och förklarande text
- utföra elektroniska strukturberäkningar på små molekyler i gasfas och i lösning samt tolka resultaten
- utföra beräkningar med hjälp av statistisk termodynamik för att beskriva atomer, molekyler och deras interaktioner
- använda moderna kvantkemiska program för att beräkna fysikaliska egenskaper och bindningsegenskaper för olika typer av molekyler och material
- använda resultat från elektroniska strukturberäkningar för att diskutera molekylär struktur och bindning, samt förklara kemiska egenskaper i både molekylära system och materialsystem
- analysera spektroskopiska data och extrahera relevanta molekylära egenskaper, såsom bindningslängd och molar absorptionskoefficient.

Värderingsförmåga och förhållningssätt

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- värdera och initierat diskutera betydelsen av approximationer som används för intermolekylära interaktioner och statistisk termodynamik
- utifrån insikter från teoretiska kemiska beräkningar göra relevanta bedömningar av fysikaliska egenskaper hos flera vanliga typer av molekyler och material
- värdera för- och nackdelar med olika teoretiska metoder och argumentera för val

av metod för studier av olika egenskaper relaterade till molekylär struktur, bindning och reaktivitet

- kritiskt bedöma kvantkemiska beräkningar utifrån noggrannhet och kemisk relevans
- kritiskt granska vetenskapliga rapporter
- utvärdera begränsningar av molekylär strukturinformation tillgänglig från spektroskopiska mätningar.

Kursens innehåll

Föreläsningar (7,5 hp): behandlar kvantkemi och statistisk termodynamik, inklusive en statistisk tolkning av entropi, ensembler. Kursen belyser grundläggande bidrag till interaktioner mellan atomer, (bio)molekyler och ytor. Kursen omfattar också grundläggande programmering / skript för import och analys av komplexa data; montering, visualisering och presentation av data. Grunderna för rotations-, vibrations- och elektroniska spektroskopier, både i absorptions- och utsläppslägena samt grundläggande begrepp, Ramanspektroskopi och cirkulär dikroismspektroskopi behandlas också.

Övningar och inlämningsuppgifter (4 hp): syftar till att illustrera och exemplifiera de begrepp som introduceras och diskuteras i föreläsningarna. Inlämningsuppgifterna kan generera bonuspoäng som kommer att läggas till resultatet vid den skriftliga tentamen.

Laborationer (3,5 hp): syftar till att illustrera och exemplifiera de begrepp som introduceras i föreläsningarna och kan vara experimentella eller beräkningsmässiga. Studenterna utbildas i rapportskrivning och peer review där andra rapporter kritiserar och konstruktiv återkoppling utbyts.

Kursens genomförande

Undervisningen utgörs av föreläsningar, eventuellt i inspelat format, övningar, inlämningsuppgifter och laborationer. Inlämningsuppgifter och laborationer samt tillhörande moment är obligatoriskt.

Kursens examination

Examination sker skriftlig i form av tentamen vid kursens slut, samt genom obligatoriska moment under kursens gång.

För studerande som ej godkänts vid ordinarie tentamen erbjuds ytterligare tentamenstillfälle i nära anslutning härtill.

Om så krävs för att en student med varaktig funktionsnedsättning ska ges ett likvärdigt examinationsalternativ jämfört med en student utan funktionsnedsättning, så kan examinator efter samråd med universitetets avdelning för pedagogiskt stöd fatta beslut om alternativ examinationsform för berörd student.

Prov/moment för denna kurs finns i en bilaga i slutet av dokumentet.

Betyg

Betygsskalan omfattar betygsgraderna Underkänd, Godkänd, Väl godkänd.

För att bli godkänd på hela kursen krävs godkänd tentamen samt godkända obligatoriska moment.

Betygsskalan för tentamen är Underkänd, Godkänd, Väl godkänd. Betygsskalan för inlämningsuppgifter och laborationsrapporter är Underkänd och Godkänd.

Slutbetyget avgörs genom en sammanvägning av tentamensresultatet samt bonuspoäng på inlämningsuppgifterna.

Förkunskapskrav

För tillträde till kursen krävs grundläggande behörighet, engelska 6/b samt 90 hp avklarade naturvetenskapliga kurser, inklusive godkända kurser motsvarande:

- KEMA20 Allmän kemi 15 hp,
- KEMA01 Organisk kemi - grundkurs 7,5 hp,
- KEMA03 Biokemi - grundkurs 7,5 hp,
- KEMB09 Fysikalisk kemi – grundkurs 15 hp samt
- MATA03 Matematik för naturvetare 1 15 hp eller motsvarande.

Tillträdeskraven är uppfyllda även för den som har grundläggande behörighet, engelska 6/B, samt godkända kurser motsvarande:

- 75 hp fysik inklusive kunskaper motsvarande FYSC11 Atom- och molekylfysik, 7,5 hp och FYSC13 Fasta tillståndets fysik, 7,5 hp samt
- 30 hp matematik.

Motsvarande förkunskaper, som inhämtats på annat sätt, ger också tillträde till kursen.

Övrigt

Kursen kan inte ingå med full poäng i examen tillsammans med KEMB08 Molekylär växelverkan och struktur 15 hp.

Kursen ges vid Kemiska institutionen, Lunds universitet.

Prov/moment för kursen KEMM30, Kemi: Molekylära drivkrafter och kemisk bindning

Gäller från H19

- 1901 Molekylära drivkrafter och kemisk bindning, 7,5 hp
Betygsskala: Underkänd, Godkänd, Väl godkänd
- 1902 Molekylära drivkrafter och kemisk bindning, obl. moment, 4,0 hp
Betygsskala: Underkänd, Godkänd
- 1903 Molekylära drivkrafter och kemisk bindning, laborationer, 3,5 hp
Betygsskala: Underkänd, Godkänd