



Stockholms
universitet

Institutionen för organisk kemi

Kursplan

för kurs på avancerad nivå

Teoretisk organisk kemi

Theoretical Organic Chemistry

15.0 Högskolepoäng

15.0 ECTS credits

Kurskod: KO7007
Gäller från: HT 2009
Fastställd: 2009-08-20
Institution Institutionen för organisk kemi

Huvudområde: Kemi
Fördjupning: AXX - Avancerad nivå, kurs/er som inte kan klassificeras

Beslut

Denna kursplan är fastställd av Naturvetenskapliga fakultetsnämnden vid Stockholms universitet 2009-08-20.

Förkunskapskrav och andra villkor för tillträde till kursen

För tillträde till kursen krävs kunskaper motsvarande minst 75 högskolepoäng i kemi, där kurserna Organisk kemi I, GN, 15 hp (KO3001) och Organisk kemi – reaktivitet och struktur, GN, 15 hp (KO5001) eller motsvarande ingår. Engelska B eller motsvarande.

Kursens uppläggning

Provkod	Benämning	Högskolepoäng
MOM1	Teori	7.5
MOM2	Övningar	7.5

Kursens innehåll

a) Kursen vänder sig till studenter som vill lära sig att kombinera syntetisk organisk kemi med kvantkemisk modellering för att på så sätt få en djupare förståelse för organkemiska processer. Datorbaserade simuleringar är idag ett mycket värdefullt hjälpmedel inom i stort sett alla grenar av kemin, där i synnerhet kvantkemi har haft stor genomslagskraft och visat sig mycket värdefullt inom den organkemiska och metallorganiska kemin. Den kontinuerliga utvecklingen av såväl grundläggande teorier som beräkningstekniker i kombination med en stark utveckling på datorsidan har lett till en snabb expansion av området. Det är idag möjligt att genomföra beräkningar och modelleringar med stor noggrannhet till ett ringa pris. Inom ramen för kursen kommer såväl kvalitativa som kvantitativa aspekter av kvantkemi med tydligt fokus mot organkemiska och metallorganiska applikationer att behandlas. Olika teorier och modeller som används för att beskriva begreppen kemisk bindning och kemiska strukturer kommer att diskuteras.

b) Kursen består av följande moment:

- 1) Teori (Theory) 7,5 hp
 - grundläggande kvantkemi
 - molekylorbitalteori
- 2) Övningar (Exercises) 7,5 hp
 - teoretiska övningar
 - datorbaserade beräkningar

Förväntade studieresultat

Efter att ha genomgått kursen ska studenten kunna:

- analysera och redogöra för sambanden mellan molekylär geometri och elektronstruktur hos organiska

föreningar

- använda molekylorbitalteori för att förstå och beskriva organisk reaktivitet
- genomföra avancerade beräkningar av kemiska strukturer och reaktioner
- formulera strategier för att modellera kemiska reaktioner, samt att kunna genomföra tester för att bedöma validiteten av dessa modeller
- kritiskt granska beräkningskemiska resultat publicerade i vetenskapliga tidskrifter med inriktning mot organisk och metallorganisk kemi
- använda konventionella kvantkemiska beräkningsprogram

Undervisning

Undervisningen består av föreläsningar, övningar och datorlaborationer. Deltagande i övningar och datorlaborationer är obligatoriskt. Om särskilda skäl föreligger kan examinator efter samråd med vederbörande lärare medge den studerande befrielse från skyldigheten att delta i viss obligatorisk undervisning.

Kunskapskontroll och examination

a. Kursen examineras på följande vis: Kunskapskontroll för momentet teori sker genom skriftliga och/eller muntliga teoretiska prov.

b. Betygsättning sker enligt en sjugradig målrelaterad betygsskala:

A = Utmärkt

B = Mycket bra

C = Bra

D = Tillfredsställande

E = Tillräckligt

Fx = Otillräckligt

F = Helt Otillräckligt

c. Kursens betygskriterier delas ut vid kursstart.

d. För godkänt krävs lägst betygsgraden E samt att övningar, laborationer och all annan obligatorisk undervisning har genomförts, redovisats och bedömts som godkänd.

e. Studerande som underkänts i ordinarie prov har rätt att genomgå minst fyra ytterligare prov så länge kursen ges. Med prov jämställs också andra obligatoriska kursdelar. Studerande som godkänts på prov får inte genomgå förnyat prov för högre betyg. Studerande som underkänts på prov två gånger har rätt att begära att annan lärare utses för att bestämma betyg på kursen. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen.

Övergångsbestämmelser

Studerande kan begära att examination genomförs enligt denna kursplan även efter det att den upphört att gälla, dock högst tre gånger under en tvåårsperiod efter det att undervisning på kursen upphört. Framställan härom ska göras till institutionsstyrelsen.

Begränsningar

Kursen kan ej ingå i examen tillsammans med kurserna Kemisk bindning (KE3770), Metallorganisk kemi (KO7002) eller motsvarande.

Övrigt

Kursen ingår i masterprogrammen i organisk kemi och i läkemedelskemi men kan också läsas som fristående kurs.

Kurslitteratur

Kurslitteratur beslutas av institutionsstyrelsen och redovisas därefter i bilaga till kursplanen.