

DATORKEMI - Molekylär struktur och funktion, grundkurs 10 p  
(Computational chemistry - Molecular structure and function, basic course,  
10 credits)

Kursplanen är fastställd av matematisk-naturvetenskapliga  
fakultetsnämnden 1997-02-27.

### 1. Placering i utbildningen och förkunskapskrav

Kursen ingår som avslutande kurs på kemistinjens basblock men kan också  
läsas som fristående kurs. För tillträde till kursen krävs kurser  
motsvarande 40p kemi varav minst biokemi 10p samt fysikalisk kemi 5p.

### 2. Mål

Datorn är ett lika självklart arbetsredskap för kemisten som provröret.  
Kursen vill med konkreta exempel visa hur datorn kan användas inom den  
moderna kemin, alltifrån fysikalisk kemi till biokemi. Kursen vill också visa  
hur olika teoretiska och experimentella angreppssätt kan leda mot samma  
mål: t.ex. molekylmodellering och rationell design eller kombinatorisk kemi  
vid läkemedelsutveckling. Kursen är ett samarbete mellan institutionerna  
för Biokemi, Biofysik, Neurokemi, Fysikalisk kemi och Fysik.

### 3. Innehåll

Kvantkemi: Grundläggande kvantkemi med tillämpningar på molekylära  
problem.

Makromolekyler: Intermolekylär växelverkan och jämviktsegenskaper.

Biomolekyler - sekvens-struktur-dynamik: Proteiner. DNA/RNA. Protein-  
DNA växelverkan

Molekylär igenkänning och design av ligander: Liganders egenskaper.  
Växelverkan ligand/makromolekyl. Design av ligander.

### 4. Undervisning

Undervisning sker i form av föreläsningar och övningar. Deltagande i  
övningarna är obligatoriskt. Om särskilda skäl föreligger kan examinator

efter samråd med vederbörande lärare medge den studerande befrielse från skyldighet att delta i vissa obligatoriska moment.

## **5. Examination**

Examination sker i form av dels inlämningsuppgifter, dels skriftliga tentamina under kursens gång.

Som betyg på kursen används något av uttrycken underkänd, godkänd eller väl godkänd. Studerande som underkänts i skriftligt prov har rätt att genomgå förnyat prov. 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 skall göras till institutionsstyrelsen för Biokemi.

## **6. Litteratur**

Kurslitteratur fastställs av institutionsstyrelsen för Biokemiska Institutionen.