



# KD1070 Molekylär struktur 6,0 hp

## Molecular Structure

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

## Fastställande

Skolchef vid CBH-skolan har 2021-10-14 beslutat att fastställa denna kursplan att gälla från och med VT2022 (diarienummer C-2021-2104).

## Betygsskala

A, B, C, D, E, FX, F

## Utbildningsnivå

Grundnivå

## Huvudområden

Teknik

## Särskild behörighet

KE1140 Teknisk kemi eller motsvarande

## Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

# Lärandemål

Efter kursen skall studenten kunna

1. formulera, modellera och lösa problem för enklare kvantmekaniska system och kvantmekaniskt beskriva och analysera atomära och molekylära egenskaper samt identifiera, urskilja och illustrera olika faktorer som bidrar till kemisk bindning och intermolekylär växelverkan och deras roll i materiens egenskaper.
2. beskriva och förklara grundläggande spektroskopiska begrepp och deras roll i spektroskopiska experiment och verktyg samt beräkna och förklara resultaten av olika spektroskopiska och strukturkemiska experiment och relatera dessa till molekylära egenskaper och fasegenskaper.

i syfte att

- självständigt kunna identifiera, förklara och förutse kemiska ämnens miljöeffekter och klimatpåverkan samt motivera hållbara åtgärder
- i yrkeslivet kunna identifiera och angripa problem som berör molekylära och materialegenskaper och spektroskopiska mätmetoder

# Kursinnehåll

- Elementär kvantmekanik
- Atomers elektronstruktur, atomorbitaler, periodiska systemets uppbyggnad
- Kemisk bindning, molekylorbitaler, hybridisering, singlett- och triplettillstånd, tillämpningar av bindningslära på organiska, oorganiska och biologiska molekyler
- Orientering om moderna kvantkemiska beräkningsmetoder
- Intermolekylära krafter, gaser-vätskor-vätskekristaller-fasta ämnen, supramolekylära strukturer t. ex. biomembraner
- Spektroskopiska metoder som IR, Raman, UV/VIS, NMR, MS, ESCA
- Diffraktionsmetoder
- Strukturkemi
- De flesta av de experimentella metoderna och användandet av kvantkemiska beräkningsmetoder exemplifieras med laborationer.

# Examination

- LAB1 - Laborationer, 1,5 hp, betygsskala: P, F
- TEN1 - Skriftlig tentamen, 4,5 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

# Övriga krav för slutbetyg

Tentamen 4,5 hp

Laborationskurs 1,5 hp

## Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.
- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.