



KD2060 NMR-spektroskopi 6,0 hp

NMR-spectroscopy

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

Fastställande

Kursplan för KD2060 gäller från och med HT07

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Kemi och kemiteknik

Särskild behörighet

1. Grundkurserna i kemi och matematik för K eller motsvarande.
2. Kursen Kvantkemi och spektroskopi, KD2040 (9 hp) eller motsvarande rekommenderas.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Efter fullgjord kurs ska studenten kunna

- förklara och beräkna, både klassiskt och kvantmekaniskt, den experimentella uppkomsten av ett- och tvådimensionella NMR-spektra.
- förklara och beräkna effekten av Fourier-transformeringen av den detekterade NMR-signalen.
- identifiera vilka egenskaper och fenomen som NMR avskiljs från eller förenas med andra spektroskopiska metoder.
- förklara hur NMR-relaxation är kopplad till molekylär dynamik.
- förklara den grundläggande mekanismen bakom MRI och NMR diffusionsexperiment och förutse resultaten av MRI experiment utförda på enkla objekt.
- identifiera vilka spinninteraktioner påverkar NMR-data och förklara deras effekt, beskriva hur spektraleffekter kan därmed kopplas till kemiska egenskaper, och välja NMR-experiment som är bäst lämpade till att undersöka valda kemiska fenomen.

Kursinnehåll

Kursen börjar med en noggrann analys av enkla NMR fenomen (som FID - free induction decay - signalen) där spinnerna är klassiskt representerade. De mest viktiga praktiska elementen av NMR spektroskopin också diskuteras tillsammans med rollen av Fourier transformation. Därefter läggs grunden för beskrivningen av mer komplexa NMR fenomen genom kvantmekanik. Denna del av kursen avslutas med en datorsimulerings-laboration där spinnernas intressanta "kvantliv" observeras i detalj.

Efter sex teoriföreläsningar börjar tillämpningarna. Först behandlas de två viktigaste två-dimensionella (2D) NMR metoderna, COSY och NOESY spektroskopier samt några till dem relaterade metoder. NMR relaxationen som ligger till grund för NOESY spektroskopin betraktas. Denna del av kursen avslutas med orientering om strukturbestämning av proteiner i lösning med flerdimensionell NMR. Teorin kompletteras med en experimentell laboration där icke-triviala strukturproblem analyseras och löses i organiska molekyler som modell.

Avslutningsvis kommer tillämpningar av NMR på dynamiska problem. Fältgradientbaserade metoder för studier av diffusion och flöde (samt för MR imaging) diskuteras tillsammans med metoder för studier av kemiskt utbyte. Under kursens andra experimentella laboration använder vi dessa metoder för att studera dynamiska och strukturella frågor i några organiska, kolloidala och polymera system.

Kurslitteratur

J. Keeler; Understanding NMR spectroscopy, Wiley.

Examination

- LAB1 - Laboration, 1,5 hp, betygsskala: P, F
- TEN1 - 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

1. Kombinerad skriftlig/muntlig examen. Studenterna har möjligheten att själv hålla en kort föreläsning istället för muntlig examen. (TEN1;4,5 hp)
2. Godkända laborationer och beräkningsuppgift. (LAB1;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.