



Kursplan

Fakultetsnämnden för naturvetenskap och teknik

Institutionen för naturvetenskap

4KE007 Kärnmagnetisk resonansspektroskopi I: Teori och praktik, 5 högskolepoäng

Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy I: Theory & Practice, 5 credits

Huvudområde

Kemi

Ämnesgrupp

Kemi

Nivå

Avancerad nivå

Fördjupning

A1N

Fastställande

Fastställd av institutionsstyrelsen vid Institutionen för naturvetenskap 2011-09-30

Kursplanen gäller från och med höstterminen 2011

Förkunskaper

Kandidatexamen i kemi, kemiteknik eller motsvarande.

Förväntade studieresultat

Efter avslutad kurs skall studenten kunna:

- redogöra för och tillämpa grundläggande NMR-spektroskopiska begrepp;
- beskriva funktionen hos de viktigaste komponenterna i en NMR-spektrometer samt redogöra för hur NMR-signalen uppkommer och detekteras;
- relatera NMR-parametrar, såsom kemiskt skift, skalära kopplingskonstanter, relaxationstidskonstanter och linjeform, till molekylers strukturer och dynamik;
- redovisa teorin bakom de vanligaste NMR-experimenten, redogöra för vilken typ av information man kan utvinna ur olika typer av NMR-experiment samt välja ut lämpliga NMR-experiment för att lösa ett givet strukturproblem;
- visa färdighet i att förbereda, praktiskt utföra, analysera samt dokumentera resultat från typiska NMR-spektroskopiska experiment;
- beskriva vilka parametrar som är viktiga vid bearbetning av både 1D- och 2D-experiment;
- redogöra för risker vid användning av högfälts-NMR-utrustning;
- demonstrera kunskaper om rutiner vid användning av en Varian 500MHz NMR instrument;

- tolka och tillordna både en- och tvådimensionella NMR-spektra av organisk kemiska molekyler samt
- bestämma den tredimensionella strukturen samt konformationen hos molekyler genom att kombinera information från olika NMR-metoder.

Innehåll

Kursen syftar till att ge praktiska och teoretiska kunskapar om NMR-spektroskopi. De teoretiska momenten inbegriper grundläggande teori om kärnspinnresonans och hur detta fenomen kan utnyttjas för att få kunskap om den kemiska strukturen hos organiska molekyler. Kemiskt skift, J-koppling, relaxation och kärn-Overhauser-effekt (NOE) behandlas. Vektormodellen används under kursen som ett verktyg för att analysera utfallet av de olika pulssekvenser som de vanligaste NMR-experimenten består av. Kursens tyngdpunkt ligger på tillämpning, vilket innebär ett flertal praktiska moment, både datorövningar och laborationer vid spektrometer. Dessa praktiska moment behandlar datainsamling, bearbetning och analys av experiment som används för strukturbestämning av organiska molekyler. Dessa experiment inbegriper endimensionella ^1H - och ^{13}C -experiment samt även tvådimensionella experiment, som COSY, TOCSY och heteronukleära experiment. Kursen avslutas med ett av kursansvarig och examinator fastställt projekt där studenten skall utreda den kemiska strukturen hos en organisk förening genom att själv utföra och analysera de olika NMR-experiment som behandlats under kursen.

Särskild vikt läggs på att kursdeltagaren lär sig den praktiska användningen av Varian 500MHz NMR-utrustning, inklusive säkerhetsaspekter och rutiner för hantering av enklare 1-D och 2-D experiment.

Delkurs 1: Teori 2,5 hp

Delkurs 2: Laborationer 2,5 hp

Undervisningsformer

Undervisningen utgörs av föreläsningar, gruppövningar och laborationer. Deltagande i gruppövningar och laborationer är obligatoriskt. Undervisningsformerna ska träna studerande i att aktivt söka, samla och värdera kunskap, tillämpa kunskap i praktiken samt att presentera och diskutera resultat i samband med gruppövningar och laborationer.

Examinationsformer

Kursen bedöms med betygen Underkänd, Godkänd eller Väl godkänd.

Examinationen i delkurs 1 sker genom aktivt deltagande i övningar samt genom skriftlig tentamen och muntlig redovisning. På delkurs 1 ges betyget Underkänd, Godkänd eller Väl godkänd. Antalet tentamenstillfällen är begränsat till fem gånger.

Examinationen i delkurs 2 innefattar genomförande av praktiska laborativa moment och inlämning av skriftliga laborationsrapporter. På den laborativa delen ges betyget Underkänd eller Godkänd. Examination av laborativa moment är begränsat till fem gånger.

Betygssättningen baseras både på individuella resultat och i förekommande fall på resultat som åstadkoms genom grupparbete. Betygsgraderna som används vid betygssättningen av kursen som helhet är Underkänd, Godkänd och Väl godkänd. Bedömningskriterier för betyget Godkänd framgår av Förväntade studieresultat (se ovan).

Kursvärdering

En skriftlig kursvärdering genomförs i slutet av kursen. Utvärderingsresultatet sammanställs i en kursrapport, vilken arkiveras hos institutionens administration. Resultatet av utvärderingen och eventuellt vidtagna åtgärder kommuniceras med sektionschef, och presenteras för studenterna vid nästa kurstillfälle.

Kurslitteratur och övriga läromedel

Obligatorisk litteratur

Sanders, J.K.M. & Hunter, B.K. (1993) *A Guide for Chemists: Modern NMR Spectroscopy*. Oxford University Press, Oxford, pp328. ISBN-13: 978-0198555674.

Dessutom tillkommer vetenskapliga artiklar vilka tillhandahålls av kursledningen.

Laborationskompendium: "NMR spectroscopy Laboratory Exercises– I.A. Nicholls, J.G. Wiklander & S. Wikman", LnU, 2011.

Övningskompendium: "NMR spectroscopy Theory Exercises", I.A. Nicholls, J.G. Wiklander & S. Wikman", LnU, 2011.