

# Kemisk bindning

Programkurs

6 hp

Chemical Bonding

NKED22

Gäller från: 2019 VT

**Fastställd av**

Programnämnden för kemi, biologi och  
bioteknik, KB

**Fastställandedatum**

2018-08-31

## Huvudområde

Kemi

## Utbildningsnivå

Avancerad nivå

## Fördjupningsnivå

A1X

## Kursen ges för

- Masterprogram i Chemistry

## Förkunskapskrav

OBS! Tillträdeskrav för icke programstudenter omfattar vanligen också tillträdeskrav för programmet och ev. tröskelkrav för progression inom programmet, eller motsvarande.

## Rekommenderade förkunskaper

Kandidatexamen i kemi

## Lärandemål

Kursen avser att ge kunskaper om hur molekylers elektronstruktur och geometriegenskaper bestäms av resultaten från den elementära kvantmekaniska teorin, samt hur molekylernas egenskaper avspeglar sig i elektroniska och strukturella egenskaper hos olika material. Kursen avser att ge studenterna redskap att kunna diskutera kemisk bindning utifrån molekylorbitalbegreppet och att kunna rationalisera orbitalernas utseende och spektra från infraröd- och ramanspektroskopi utifrån symmetrihänsyn, samt förmedla färdigheter i att hantera moderna molekylmodelleringsverktyg. Efter avslutad kurs förväntas studenten kunna:

- redogöra för enkel kvantmekanisk teori och hur denna kan tillämpas för att härleda kvantisering och orbitalbegreppet samt för att utföra kvantkemiska beräkningar
- använda molekylorbitalteori för att förklara molekylers elektronstruktur
- beskriva kovalent bindning i molekyler baserat på molekylorbitalteori
- diskutera olika former av kemisk bindning och deras relevans för materials egenskaper
- förklara materials elektriska egenskaper utifrån deras elektronstruktur
- utföra enkel datorbaserad molekylmodellering
- tillämpa symmetriargument för att klassificera molekylgeometrier, orbitaler och vibrationsmoder samt för att förklara vibrationsspektras utseende

## Kursinnehåll

Kvantmekanik: Schrödingerekvationen, energikvantisering, vågfunktioner, väteatomen, atomorbitaler, orbitalenergiagram.

Kvantkemi: diatomära molekyler, molekylorbitaler, kemiska bindningstyperna kovalent bindning, polär kovalent bindning och jonbindning, större molekyler, Hückelapproximationen, beräkningskemi.

Symmetri: operationer och symmetrielement, symmetriklassificering, punktgrupper, karaktärstabeller, tillämpningar på molekylorbitaler, elektronexcitations- och vibrationspektroskopi.

Krystaller: olika typer av kristallbindning såsom kovalent nätverksbindning och metallbindning, kristallstruktur, röntgen- och neutrondiffraction, bandteori.

Laborationskurs där molekylmodellering utförs samt vibrationspektra undersöks.

## Undervisnings- och arbetsformer

Kursen består av föreläsningar, lektioner och laborationer.

## Examination

LAB1	Laborationskurs	2 hp	U, G
TEN1	Skriftlig tentamen	4 hp	U, 3, 4, 5

## Betygsskala

Fyrgradig skala, LiU, U, 3, 4, 5

## Övrig information

### Om undervisningsspråk

Undervisningsspråk visas på respektive kurstillfälle på fliken "Översikt".

- Observera att även om undervisningsspråk är svenska kan delar av kursen ges på engelska.
- Om undervisningsspråk är Svenska/Engelska kan kursen i sin helhet ges på engelska vid behov.
- Om undervisningsspråk är Engelska ges kursen i sin helhet på engelska.

### Övrigt

Kursen bedrivs på ett sådant sätt att både mäns och kvinnors erfarenhet och kunskaper synliggörs och utvecklas.

Planering och genomförande av kurs skall utgå från kursplanens formuleringar. Den kursvärdering som ingår i kursen skall därför genomföras med kursplanen som utgångspunkt.

## Institution

Institutionen för fysik, kemi och biologi

## Studierektor eller motsvarande

Magdalena Svensson

## Examinator

Lars Ojamäe

## Undervisningstid

Preliminär schemalagd tid: 46 h

Rekommenderad självstudietid: 114 h

## Kurslitteratur

### Böcker

Peter Atkins and Julio de Paula, *Atkins' Physical Chemistry* Oxford University Press

Yves Jean François Volatron, *An introduction to molecular orbitals* Oxford University Press

## Generella bestämmelser

### Kursplan

För varje kurs finns en kursplan. I kursplanen anges kursens mål och innehåll samt de särskilda förkunskaper som erfordras för att den studerande skall kunna tillgodogöra sig undervisningen.

### Schemaläggning

Schemaläggning av kurser görs efter, för kursen, beslutad blockindelning. För kurser med mindre än fem deltagare, och flertalet projektkurser läggs inget centralt schema.

### Avbrott på kurs

Enligt rektors beslut om regler för registrering, avregistrering samt resultatrapportering (Dnr LiU-2015-01241) skall avbrott i studier registreras i Ladok. Alla studenter som inte deltar i kurs man registrerat sig på är alltså skyldiga att anmäla avbrottet så att kursregistreringen kan tas bort. Avanmälan från kurs görs via webbformulär, [www.lith.liu.se/for-studenter/kurskomplettering?l=sv](http://www.lith.liu.se/for-studenter/kurskomplettering?l=sv).

### Inställd kurs

Kurser med få deltagare (< 10) kan ställas in eller organiseras på annat sätt än vad som är angivet i kursplanen. Om kurs skall ställas in eller avvikelser från kursplanen skall ske prövas och beslutas detta av programnämnden.

### Föreskrifter rörande examination och examinators

Se särskilt beslut i regelsamlingen:  
<http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622678>

### Examination

#### Tentamen

Skriftlig och muntlig tentamen ges minst tre gånger årligen; en gång omedelbart efter kursens slut, en gång i augustiperioden samt vanligtvis i en av omtentamensperioderna. Annan placering beslutas av programnämnden.

Principer för tentamensschemat för kurser som följer läsperioderna:

- kurser som ges Vt1 förstagångstentureras i mars och omtentureras i juni och i augusti
- kurser som ges Vt2 förstagångstentureras i maj och omtentureras i augusti och i oktober
- kurser som ges Ht1 förstagångstentureras i oktober och omtentureras i januari

och augusti

- kurser som ges Ht2 förstagångstenteras i januari och omtenteras i påsk och i augusti

Tentamensschemat utgår från blockindelningen men avvikelser kan förekomma främst för kurser som samläses/samtenteras av flera program samt i lägre årskurs.

- För kurser som av programnämnden beslutats vara vartannatårskurser ges tentamina 3 gånger endast under det år kursen ges.
- För kurser som flyttas eller ställs in så att de ej ges under något eller några år ges tentamina 3 gånger under det närmast följande året med tentamenstillfällen motsvarande dem som gällde före flyttningen av kursen.
- Har undervisningen upphört i en kurs ges under det närmast följande året tre tentamina samtidigt som tentamen ges i eventuell ersättningskurs, alternativt i samband med andra omtentamina. Dessutom ges tentamen ytterligare en gång under det därpå följande året om inte programnämnden föreskriver annat.
- Om en kurs ges i flera perioder under året (för program eller vid skilda tillfällen för olika program) beslutar programnämnden/programnämnderna gemensamt om placeringen av och antalet omtentamina.

### **Anmälan till tentamen**

För deltagande i tentamina krävs att den studerande gjort förhandsanmälan i Studentportalen under anmälningssperioden, dvs tidigast 30 dagar och senast 10 dagar före tentamensdagen. Anvisad sal meddelas fyra dagar före tentamensdagen via e-post. Studerande, som inte förhandsanmält sitt deltagande riskerar att avvisas om plats inte finns inom ramen för tillgängliga skrivningsplatser.

Teckenförklaring till tentaansmälningssystemet:

\*\* markerar att tentan ges för näst sista gången

\* markerar att tentan ges för sista gången

### **Ordningsföreskrifter för studerande vid tentamensskrivningar**

Se särskilt beslut i

regelsamlingen: <http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622682>

### **Plussning**

Vid Tekniska högskolan vid LiU har studerande rätt att genomgå förnyat prov för högre betyg på skriftliga tentamina samt datortentamina, dvs samtliga provmoment med kod TEN och DAT. På övriga examinationsmoment ges inte möjlighet till plussning, om inget annat anges i kursplan.

### **Regler för omprov**

För regler för omprov vid andra examinationsformer än skriftliga tentamina och datortentamina hänvisas till LiU-föreskrifterna för examination och examinator,

<http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/VisaBeslut/622678>.

### **Plagiering**

Vid examination som innebär rapportskrivande och där studenten kan antas ha tillgång till andras källor (exempelvis vid självständiga arbeten, uppsatser etc) måste inlämnat material utformas i enlighet med god sed för källhänvisning (referenser eller citat med angivande av källa) vad gäller användning av andras text, bilder, idéer, data etc. Det ska även framgå ifall författaren återbrukat egen text, bilder, idéer, data etc från tidigare genomförd examination.

Underlåtelse att ange sådana källor kan betraktas som försök till vilseledande vid examination.

### **Försök till vilseledande**

Vid grundad misstanke om att en student försökt vilseleda vid examination eller när en studieprestation ska bedömas ska enligt Högskoleförordningens 10 kapitel examinator anmäla det vidare till universitetets disciplinnämnd. Möjliga konsekvenser för den studerande är en avstängning från studierna eller en varning. För mer information se <https://www.student.liu.se/studenttjanster/lagar-regler-rattigheter?l=sv>.

### **Betyg**

Företrädesvis skall betygen underkänd (U), godkänd (3), icke utan beröm godkänd (4) och med beröm godkänd (5) användas. Kurser som styrs av tekniska fakultetsstyrelsen fastställt tentamensschema skall därvid särskilt beaktas.

1. Kurser med skriftlig tentamen skall ge betygen (U, 3, 4, 5).
2. Kurser med stor del tillämpningsinriktade moment såsom laborationer, projekt eller grupparbeten får ges betygen underkänd (U) eller godkänd (G).

### **Examinationsmoment**

1. Skriftlig tentamen (TEN) skall ge betyg (U, 3, 4, 5).
2. Examensarbete samt självständigt arbete ger betyg underkänd (U) eller godkänd (G).
3. Examinationsmoment som kan ge betygen underkänd (U) eller godkänd (G) är laboration (LAB), projekt (PRA), kontrollskrivning (KTR), muntlig tentamen (MUN), datortentamen (DAT), uppgift (UPG), hemtentamina (HEM).
4. Övriga examinationsmoment där examinationen uppfylls framför allt genom aktiv närvaro som annat (ANN), basgrupp (BAS) eller moment (MOM) ger betygen underkänd (U) eller godkänd (G).

Rapportering av den studerandes examinationsresultat sker på respektive institution.

### **Regler**

Universitetet är en statlig myndighet vars verksamhet regleras av lagar och förordningar, exempelvis Högskolelagen och Högskoleförordningen. Förutom lagar och förordningar styrs verksamheten av ett antal styrdokument. I Linköpings universitets egna regelverk samlas gällande beslut av regelkaraktär som fattats av universitetsstyrelse, rektor samt fakultets- och områdesstyrelser.

LiU:s regelsamling angående utbildning på grund- och avancerad nivå nås på [http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/Innehall/Utbildning\\_pa\\_grund\\_och\\_avancerad\\_niva](http://styrdokument.liu.se/Regelsamling/Innehall/Utbildning_pa_grund_och_avancerad_niva).