

Indhold af bachelorprojekt (og specialeprojekt)

- *Organisk Kemi, Kemisk Institut, Københavns Universitet*

Nedenfor er givet nogle generelle retningslinjer for, hvad der skal/kan være i en rapport af eksperimentel karakter. Der kan flyttes rundt på indholdet i forhold til forslaget – det er op til dig/jer at skabe den bedste sammenhæng.

Du må selv om hvilket sprog du bruger – dog er dansk og engelsk de eneste sprog jeg er flydende i, så er af dem, tak!

Den *gode rapport* har både godt indhold og er skrevet pænt. Brug word, latex eller lignende og brug gerne god tid på at få figurer m.m. til at være pæne og fejlfri. Indhold er vigtigere end form, men for at få en topkarakter skal bagge dele være i orden. Sørg derfor for at have læst alt ordentligt igennem for trykfejl, figurstørrelser m.m. inden du afleverer.

Forside

Til forside: kom og få en skabelon med logoer m.m. fra mig, eller find den på universitets hjemmeside (søg på *designmanual* på www.ku.dk). Kig evt på andre folks projekter for at sikre det er den rigtige!

Forsiden har:

- Titel på projekt.
- Dit navn.
- Kemisk Institut, Københavns Universitet (sæt gerne naturvidenskabs logo på – er i skabelonen).
- Afleveringsdato.

Indholdsfortegnelse

Abstract på dansk og engelsk

Kort opsummering (½-1 side hver).

Formål

Skriv i én (eller to) sætning/paragraf formålet med projektet.

Introduktion

Indfør læseren til området; hvad er der tidligere lavet? Giv en kort baggrundsbeskrivelse (bachelor projekt) eller en længere baggrundsbeskrivelse (specialeprojekt).

Beskriv målmolekyle(r) og hvorfor de kunne være interessante/forventede egenskaber. F.eks kan du beskrive hvorfor en byggesten til DCLs er særlig god, opløselig eller lignende. F.eks. hvordan man designer et passende molekyle til brug for molekylær elektronik, NLO, absorptionsstudier i gasfasen. F.eks. hvorfor det er interessant at lave et molekyle der kan dedektere polyaminer i vandig opløsning. F.eks. hvorfor det er særligt smart at lave receptorer på netop den måde du har gjort det.

For metodeudvikling/udvikling af nye reaktioner: giv en oversigt over, hvordan den pågældende reaktion kan udføres, f.eks. opsummer alle de reaktioner, der kan omdanne et alkylhalogenid til en alkylamin, hvis dette er projektets formål.

Specielle eksperimentelle metoder (find selv passende overskrift)

Beskriv f.eks. teorien bag mikrobølgesyntese, bag NLO, eller hvordan absorptionspektre kan måles i gasfasen. Beskriv f.eks. hvorfor disulfid DCC er bedre i vand ved neutral pH end hydrazon DCC ved neutral pH og redegør for hvorfor det valg du har gjort m.h.t. metode er god/passende.

Hvad er det for en slags flydende krystaller du vil lave og hvordan vil du beskrive dem og hvordan vil du undersøge dem?

Syntesestrategi

Lav et retrosynteseskema og diskutér de enkelte trin i relation til litteraturen.

Giv mekanisme for *de fleste* reaktioner i bachelorprojektet. Giv mekanisme for relevante reaktioner i specialeprojektet (husk referencer til originallitteratur, og sæt dig godt ind i kemien!).

Resultater og diskussion

Vis et oversigtsskema med hele syntesevejen inkl. udbytte for hvert trin. Diskutér hvert trin; var flere ækvivalenter af et reagens nødvendigt for at få fuldstændig omdannelse, var det en fordel at skifte fra et solvent til et andet, var reaktionen let at følge på TLC, HPLC eller GC-MS, hvad kunne et lille udbytte skyldes (blev der observeret biprodukter?) og hvordan kunne det måske forbedres, var produktet ustabil og isåfald, hvilke forholdsregler blev der taget, osv.

Diskutér de målinger (absorptionspektroskopi, cyklisk voltammetri, m.m.), der måtte være foretaget på forbindelserne.

Hvorfor virkede eksperimentet ikke? Fejlkilder i den forbindelse? Var ideen for svær at bevise?

Konklusion

Lav en samlet konklusion og perspektivering. Hvad har du/vi/verden lært?

Foreslå hvordan projektet kan fortsættes, f.eks. hvilke nye mål molekyler, der bør laves, hvordan kunne man tænke sig, at en given syntese kunne forbedres, hvordan skal vi ændre vores syntesestrategi, hvis den har fejlet, osv.

Hvilke eksperimenter/målinger agter du/vi/andre at udføre på forbindelserne i fremtiden?

Eksperimentelt

Generelle metoder:

Beskriv i dette indledende afsnit, hvordan solventer blev tørret, hvilke instrumenter, der er brugt til karakterisering (smeltepunkt., NMR, MS, IR, UV-Vis, CV), at elementaranalyser er udført på Kemisk Institut, Københavns Universitet, osv.

Forskrifter:

Hver forskrift skal som titel have navnet på den pågældende forbindelse + et nummer der svarer til det nummer stoffet har fået i rapporten. Bruges en forskrift fra litteraturen, skal der være en henvisning hertil. Det er vigtigt at andre kan gentage dit eksperiment ud fra denne forskrift!

Giv en klar og utvetydig forskrift for syntese af hver forbindelse med angivelse af præcise mængder (i g eller mL, og i mol) for udgangsstoffer og hvert tilført reagens; for solventet skal der blot anføres volumen.

Skal der tages specielle sikkerhedshensyn?

Beskriv iagttagelser, der er gjort: farveændring, udfældning, gasudvikling, osv.

Hvilket solvent blev brugt til omkrystallisation, og hvor meget skulle der ca. bruges per 1 g stof?

Er produktet et fast stof eller en væske/olie, hvad er farven?

Oprensede du med søjlekromatografi? Hvilket materiale, hvilket solvent, hvilken størrelse søjle, hvad er R_f værdien for dit stof osv?

Beregn udbyttet i %.

Angiv smeltepunkt for alle faste stoffer og sammenlign med litteraturværdi, hvis forbindelsen er kendt: Sm.p. 135-136 °C (Litt.^{REF}: 137 °C). Er smeltepunktet målt før eller efter en omkrystallisation, og fra hvilket solvent er stoffet blevet krystalliseret? Kogepunkt angives for væsker (hvis den er blevet destilleret) og sammenlignes med en litteraturværdi (hvis kendt forbindelse) – husk at angive hvilket tryk kogepunktet er blevet målt. Angiv, så vidt det er muligt, R_f -værdi (husk at angive eluent), ^1H NMR, ^{13}C NMR og MS for alle forbindelser. (For NMR-data,

angiv det deutererede solvent og hvilken værdi, der er kalibreret efter). For nye forbindelser, skal der være en elementaranalyse! Kan dette ikke lade sig gøre (for lidt stof), få en High Resolution MS.

DOBBELTTJEK AT DINE KARAKTERISERINGSDATA ER KORREKT INDFØRT.

Vedrørende eksperimentelle data: sørg for at der forelægges et scannet kopi af alle massespektre, elementaranalyser og nmr spektre (samt cif filer for nmr). Disse spektre/scans skal gengives i et appendix til bachelorprojekter og specialeprojekter. Dette skyldes at spektre viser at stofferne er analyserene, og at eventuelle publikationer baseret på resultaterne i rapporten er afhængig af en fuldstændig karakterisering (ingen analysedata, ingen publikation!).

Referencer

Vær omhyggelig – der må IKKE være fejl i referencelisten! Undlad at bruge *et al.*, men nævn alle forfattere. Det er rart med både startsidetal og slusidetal. Brug opsætning, der svarer til den, der bruges af enten Wiley, ACS eller RSC:

Wileys opsætning (foretrækkes):

M. B. Nielsen, C. Lomholt, J. Becher, *Chem. Soc. Rev.* **2000**, 29, 153-164.

Når der refereres til bøger er det vigtigt at være konsistent. Husk at angive hvilket afsnit i bogen/afhandlingen der refereres til.

Rapport:

M. Pittelkow, *Supramolekylær kemi med dendrimerer – specialerapport*, p. 15, **2003**.

Bog:

F. A. Carey, R. J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry – Part A: Structure and Mechanisms*, fourth edition, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, p. 46, **2000**.

Appendix

Vedlæg kopi af alle spektre. Tegn strukturen af pågældende forbindelse på spektret.