



LUNDS UNIVERSITET  
Lunds Tekniska Högskola

Kursplan för läsåret 2002/2003

---

## MOLEKYLÄR VÄXELVERKAN OCH DYNAMIK KFK090

### Molecular Interactions and Dynamics

**Antal poäng:** 5. **Betygskala:** TH. **Obligatorisk för:** B2, K2. **Kursansvarig:** Prof. Bengt Jönsson, [Bengt.Jonsson@bpc.lu.se](mailto:Bengt.Jonsson@bpc.lu.se). **Rekommenderade förkunskaper:** Matematik AK, Linjär algebra, Termodynamik. **Prestationsbedömning:** Skriftliga deltentamina samt godkända laborationer. **Webbsida:** <http://www.bpc.lu.se/education/kurser>.

#### Mål

Kursen skall ge grundläggande kunskaper om växelverkan, struktur och dynamik i molekyllära system samt förmåga att tillämpa dessa kunskaper på praktiska problem av relevans för kemiteknik och bioteknik.

#### Innehåll

Kursen består av två delar: Växelverkan och struktur (ca 2/3 av kursen) samt Molekyllär dynamik (ca 1/3 av kursen).

I den första delen av kursen visas hur intermolekyllär växelverkan ger upphov till struktur på mikroskopisk och mesoskopisk nivå samt kvalitativt kan förklara och förutsäga materialets makroskopiska egenskaper. Detta ger en molekyllär förklaring till stora delar av den fenomenologiska termodynamiken. Innehållsmässigt består denna kursdel av tre huvudmoment: (1) klassisk elektrostatik och intermolekyllär växelverkan, (2) statistisk termodynamik med tillämpningar på bl.a. adsorption, vätskor och elektrolytlösningar, samt (3) molekyllära simuleringsmetoder.

Den andra delen av kursen behandlar molekylers rörelse i gaser (kinetisk gasteori) och vätskor (diffusion) och ger därmed den molekyllära grunden för makroskopiska transportprocesser. Vidare visas hur molekyllära egenskaper bestämmer de hastighetskonstanter som uppträder i den fenomenologiska reaktionskinetiken.

#### Litteratur

Atkins, P.W., Physical Chemistry, 7th ed., Oxford, 2002.  
Kompendium med kompletterande text samt övningsuppgifter.  
Laborationshandledningar.