



LUNDS UNIVERSITET
Lunds Tekniska Högskola

Kursplan för läsåret 2007/2008

MOLEKYLÄR VÄXELVERKAN OCH DYNAMIK

KFK090

Molecular Interactions and Dynamics

Antal högskolepoäng: 7,5. **Betygskala:** TH. **Nivå:** G2 (Grundnivå, fördjupad).

Undervisningsspråk: Kursen ges på svenska. **Obligatorisk för:** B2, K2. **Valfri för:** N4, N4nm, Pi3, Pi3bm, Pi4bs. **Kursansvarig:** Professor Bengt Jönsson,

Bengt.Jonsson@bpc.lu.se, Biofysikalisk kemi. **Förutsatta förkunskaper:** FMA410

Matematik, endimensionell analys, FMA420 Linjär algebra, KFK080 Termodynamik.

Prestationsbedömning: Examination sker genom en skriftlig tentamen. För slutbetyg krävs också att kursens fyra obligatoriska laborationer är godkända. **Hemsida:**

<http://www.bpc.lu.se/education/kurser>.

Syfte

Ett syfte med kursen är att ge studenterna en inblick i hur molekylära interaktioner styr makroskopiska systems statiska och dynamiska egenskaper. Ett annat syfte är att träna studenterna i att använda och förstå den matematiska formalism som framtagits i kursen för att ge en molekylär beskrivning av några olika termodynamiska fenomen.

Mål

Kunskap och förståelse

För godkänd kurs skall studenten

- Förstå den statistiska bakgrunden till Boltzmann fördelningslag.
- Kunna beskriva och klassificera vilka olika molekylära egenskaper som påverkar den intermolekylära interaktionen.
- Kunna använda de olika modeller som framtagits i kursen för att beskriva följande termodynamiska fenomen: Fasomvandlingar, blandningsluckor, azeotroper, fördelningsjämvikter, jonlösningars ickeidealitet och joners koncentrationsprofiler utanför laddade ytor och aggregat.
- Kunna beskriva de viktigaste delarna i den kinetiska gasteorin.
- Kunna ge en molekylär beskrivning av orsakerna till transportfenomenen; diffusion, effusion, konvektivt flöde och jontransport i elektriska fält.

Färdighet och förmåga

För godkänd kurs skall studenten

På ett riktigt sätt kunna utnyttja de facktermer som används för att beskriva den intermolekylära växelverkan.

Värderingsförmåga och förhållningssätt

För godkänd kurs skall studenten

Kunna värdera giltigheten för de olika modeller som framtagits i kursen.

Innehåll

Kursen består av två delar: Växelverkan och struktur (ca 75% av kursen) samt Molekylär dynamik (ca 25% av kursen).

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

Den andra delen av kursen behandlar molekylers rörelse i gaser (kinetisk gasteori) och vätskor (diffusion) och ger därmed den molekylära grunden för makroskopiska transportprocesser.

Litteratur

Jönsson, B: Kompendium 1 och 2 i Molekylär växelverkan och dynamik. Biofysikalisk kemi 2007.