



LUNDS UNIVERSITET
Lunds Tekniska Högskola

Kursplan för läsåret 2010/2011
(Genererad 2010-06-28.)

MOLEKYLÄR VÄXELVERKAN OCH DYNAMIK KFK090

Molecular Interactions and Dynamics

Antal högskolepoäng: 7,5. **Betygsskala:** TH. **Nivå:** G2 (Grundnivå, fördjupad).
Huvudområde: Teknik. **Undervisningsspråk:** Kursen ges på svenska. **Obligatorisk för:** B2, K2. **Valfri för:** N4m, N4nbm, Pi4, Pi4bm, Pi4bs. **Kursansvarig:** Bengt Jönsson, Bengt.Jonsson@bpc.lu.se och Kristofer Modig, kristofer.modig@bpc.lu.se, Biofysikalisk kemi. **Förutsatta förkunskaper:** FMAA01 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.mps.lu.se/bpc/teaching>.

Syfte

Syftet med kursen är att ge studenterna en inblick i hur intermolekylära interaktioner styr makroskopiska systems statiska och dynamiska egenskaper.

Mål

Kunskap och förståelse

För godkänd kurs skall studenten

- Kunna förklara den statistiska bakgrunden till Boltzmann fördelningslag.
- Kunna beskriva och klassificera vilka olika molekulära egenskaper som ger upphov till den intermolekylära interaktionen.
- Kunna använda och förstå bakgrunden till några olika termodynamiska modeller som framtagits för att beskriva följande fenomen: Fasomvandlingar, blandningsluckor, azeotroper, fördelningsjämvikter samt jonlösningars ickeidealitet.
- Kunna beskriva de viktigaste delarna i den kinetiska gasteorin.
- Kunna ge en molekulär beskrivning av orsakerna till transportfenomenet diffusion.

Färdighet och förmåga

För godkänd kurs skall studenten

- Kunna ställa upp och utföra fördelningsberäkningar med hjälp av Boltzmanns fördelningslag
- Från molekulära parametrar kunna beräkna den inre energin och entropin för en ideal diatomär gas.

- Kunna beräkna hur den andra virialkoefficienten för en gas påverkas av styrkan och avståndsberoendet i den intermolekylära växelverkan mellan två gasmolekyler.
- Kunna beräkna den elektrostatiska interaktionen mellan två fixt placerade laddningsfördelningar.
- Kunna beräkna hur den elektrostatiska medelinteraktionen mellan två laddningsfördelningar påverkas av laddningsfördelningarnas mono och dipolmoment samt avståndet mellan laddningsfördelningarna.
- Med hjälp av Bragg-Williamsmodellen, kunna modellera olika fenomen som uppstår vid en blandning av två vätskor.
- Kunna beräkna aktivitetsfaktorerna för olika joner i en lösning med hjälp av Debye-Hückel ekvationen.
- Kunna beräkna hur hastighetsfördelningen på molekylerna i en gas påverkas av parametrarna temperatur och molmassa
- Kunna beräkna hur den kvadratiska medelförflyttningen i en diffusiv process varierar som funktion av tiden som förflyttningen pågår.
- Kunna förstå och rätt använda de facktermer som introduceras i de olika kursmomenten.

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 80% av kursen) samt Molekylär dynamik (ca 20% 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 materiens 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

För studenter på K, N och Pi:

Jönsson, B: Kompendium 1 och 2 i Molekylär växelverkan och dynamik. Biofysikalisk kemi 2011.

För studenter på B:

Dill, K and Bromberg, S: Molecular driving forces. Statistical thermodynamics in Chemistry and Biology. Taylor & Francis Inc 2002. ISBN: 0815320515.