



LUNDS UNIVERSITET
Lunds Tekniska Högskola

Kursplan för läsåret 2011/2012
(Genererad 2011-08-31.)

MOLEKYLÄRA DRIVKRAFTER 2: VÄXELVERKAN OCH DYNAMIK KFKF01

Molecular Driving Forces 2: Interactions and Dynamics

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

Huvudområde: Teknik. **Undervisningsspråk:** Kursen ges på svenska. **Överlappar**

följande kurs/kurser: KFK080 och KFK090. **Obligatorisk för:** B2. **Kursansvarig:**

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.cmps.lu.se/bpc/teaching/>.

Syfte

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

Mål

Kunskap och förståelse

För godkänd kurs skall studenten

- Kunna ge en molekylär beskrivning av orsakerna till transportfenomenet diffusion.
- Kunna förklara begreppen aktiveringsenergi och detaljerad balans och deras betydelse i olika sammanhang, så som reaktionskinetik, proteinveckning och katalys.
- Kunna beskriva och klassificera vilka olika molekylära egenskaper som ger upphov till den intermolekylära interaktionen.
- Med utgångspunkt i den elektriska potentialen kunna diskutera diverse fenomen, så som elektrokemiska jämvikter och jonsolvatisering.
- Kunna använda och förstå bakgrunden till några olika termodynamiska modeller som framtagits för att beskriva makroskopiska fenomen så som fasomvandlingar, blandningsluckor, azeotroper, fördelningsjämvikter och jonlösningars ickeidealitet.
- Visa fundamental förståelse av den viktigaste fysiken för biopolymerer, så som kooperativ sekundärstrukturbildning, adsorption, biokatalys och kooperativ ligandbindning.
- Kunna beskriva de viktigaste egenskaperna hos vatten så som vätebindningsstruktur, densitetens temperaturberoende, principen för den hydrofoba effekten och vattens betydelse för termodynamiken i biokemiska processer.

Färdighet och förmåga

För godkänd kurs skall studenten

- Kunna beräkna olika bidrag till interaktionen mellan två molekyler, så som mono- och dipolmoment samt dispersionskrafter.
- Med hjälp av enkla gittermodeller kunna modellera några olika fenomen så som fasövergångar, destillation, blandningsluckor, sekundärstrukturbildning i proteiner, adsorption på ytor samt polymerelasticitet och polymerkollaps.
- Praktiskt och teoretiskt kunna uppskatta olika bidrag till löslighet, så som solvatisering enligt Born-ekvationen och jon-joninteraktionen enligt Debye-Hückelteorin.
- Kunna uppskatta effekten av diffusion i biokemiskt relevanta problemställningar, såsom diffusion genom geler, diffusionskontrollerad reaktionskinetik och hur molekylära motorer drivs av diffusiva flöden.
- Praktiskt och teoretiskt tillämpa principerna för molekylardynamiksimuleringar och stokastiska simuleringar.
- Kunna skriva enkla men fullständiga laborationsredogörelser.

Värderingsförmåga och förhållningsätt

För godkänd kurs skall studenten

- kunna diskutera biologiskt relevanta frågeställningar, så som proteinveckning, diffusion längs biologiska membran och molekylmotorer, utifrån de grundläggande modeller som ges på kursen.

Innehåll

- Kursen visar hur intermolekylär växelverkan ger upphov till struktur på mikroskopisk och mesoskopisk nivå samt hur den kvalitativt kan förklara och förutsäga materialets makroskopiska egenskaper. Detta ger en molekylär förklaring till stora delar av termodynamiken och makroskopiska transportprocesser samt ger de verktyg som behövs för att man skall kunna förutsäga hur molekylära manipulationer påverkar ett (bio)materialets makroskopiska egenskaper.
- Innehållsmässigt består kursen av klassisk elektrostatik och intermolekylär växelverkan samt statistisk termodynamik med tillämpningar på bl.a. adsorption, vätskor och elektrolytlösningar.
- Särskild vikt läggs vid egenskaper hos biopolymerer, så som proteiner och DNA-molekyler.
- Två hela föreläsningar ägnas åt vattens egenskaper och unika betydelse för solvatisering av och interaktionen mellan såväl små som stora (bio)molekyler.
- Vidare behandlar kursen molekylers rörelse i vätskor (diffusion) och ger därmed den molekylära grunden för makroskopiska transportprocesser och reaktionskinetiken för enzymer.
- Kursen avslutas med en kort introduktion till (bio)polymerfysik, där begrepp som elasticitet, kollaps och dynamik diskuteras.

Litteratur

Dill, K and Bromberg, S: Molecular driving forces. Statistical thermodynamics in Chemistry, Physics, Biology and Nanoscience. 2nd edition. Garland Publishing Inc 2010. ISBN: 9780815344308.