



LUNDS UNIVERSITET  
Lunds Tekniska Högskola

*Kursplan för*

## **Molekylär växelverkan och dynamik Molecular Interactions and Dynamics**

**KFK090, 7,5 högskolepoäng, G2 (Grundnivå, fördjupad)**

**Gäller för:** Läsåret 2012/13

**Beslutad av:** Utbildningsnämnd 2

**Beslutsdatum:** 2012-04-04

### **Allmänna uppgifter**

**Huvudområde:** Teknik.

**Obligatorisk för:** K2

**Valfri för:** N4-nbm, N4-m, Pi4, Pi4-bs, Pi4-bm

**Undervisningsspråk:** Kursen ges på svenska

### **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 förklara den statistiska bakgrunden till Boltzmann fördelningslag.
- Kunna beskriva och klassificera vilka olika molekylära 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 molekylär 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 molekylära 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 kvadratiske 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 förhållningsätt*

För godkänd kurs skall studenten

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

## **Kursinnehåll**

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 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.

## **Kursens examination**

**Betygsskala:** TH

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

## **Antagningsuppgifter**

**Förutsatta förkunskaper:** FMAA01 Endimensionell analys, FMA420 Linjär algebra, KFK080 Termodynamik.

**Begränsat antal platser:** Nej

**Kursen överlappar följande kurser:** KFKA05, KFKF01

## **Kurslitteratur**

- Jönsson, B: Kompendium 1 och 2 i Molekylär växelverkan och dynamik. Biofysikalisk kemi 2012.

## **Kontaktinfo och övrigt**

**Kursansvarig:** Bengt Jönsson, [Bengt.Jonsson@bpc.lu.se](mailto:Bengt.Jonsson@bpc.lu.se)

**Hemsida:** <http://www.cmps.lu.se/bpc/teaching/>