



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 2013/14

Beslutad av: Utbildningsnämnd C

Beslutsdatum: 2013-04-15

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 statiska och dynamiska egenskaper.

Mål

Kunskap och förståelse

För godkänd kurs skall studenten

- 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.
- kunna beskriva de viktigaste egenskaperna hos vatten och för vatten som lösningsmedel.
- visa fundamental förståelse av de viktigaste egenskaperna och begreppen för polymerer och polymerlösningar, så som fasbeteenden, random flights, persistenslängd, elasticitet, kollaps och exkluderad volym.

Färdighet och förmåga

För godkänd kurs skall studenten

- med hjälp av Bragg-Williamsmodellen kunna modellera olika kännetecknande parametrar för blandningar av två ämnen, så som Henrys konstant, aktivitetskoefficienter, fördelningskoefficienter, osmotiskt tryck och kokpunktsändring.
- 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 och adsorption på ytor.
- praktiskt och teoretiskt kunna uppskatta olika bidrag till löslighet, så som solvatisering enligt Born-ekvationen och jon-joninteraktionen enligt Debye-Hückelteorin.
- behärska de enklaste modellerna av struktur och dynamik hos polymerer.
- kunna skriva enkla men fullständiga laborationsredogörelser.

Värderingsförmåga och förhållningssätt

För godkänd kurs skall studenten

- kunna diskutera vardagsfenomen, så som fassetparation mellan olja och vatten, utifrån enkla men sunda statistisk-termodynamiska resonemang.
- kunna diskutera biologiskt relevanta frågeställningar utifrån de grundläggande modeller som ges på kursen.
- kunna värdera giltigheten hos de modeller som ges på kursen.

Kursinnehåll

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 materials makroskopiska egenskaper.

Särskild vikt läggs vid egenskaper hos polymerer som ägnas två föreläsningar. Två föreläsningar ägnas också åt vattens egenskaper och unika betydelse för solvatisering av och interaktionen mellan såväl små som stora molekyler.

Vidare behandlar kursen molekylers rörelse i vätskor (diffusion) och ger därmed den molekylära grunden för makroskopiska transportprocesser och reaktionskinetiken för katalysatorer.

Innehållsmässigt består kursen av följande moment:

- Beskrivning av fas- och fördelningsjämvikter med Bragg-Williamsmodellen.
- Beskrivning av kooperativa processer, t.ex. helixbildning i polymerer.
- Klassisk elektrostatik och intermolekylär växelverkan med tillämpningar på bl.a. adsorption, vätskor, elektrolytlösningar och elektrokemiska jämvikter.
- Beskrivning av egenskaper hos flytande vatten och vatten som lösningsmedel, inklusive

den hydrofoba effekten.

- Mikroskopisk beskrivning av diffusion, inkluderande bl.a. Brownsk rörelse och kinetisk gasteori.
- Fundamental beskrivning av reaktionskinetik: aktiveringstillstånd, Eyrings och Arrhenius ekvationer samt diffusionskontrollerade hastighetskonstanter.
- Introduktion till modellering av egenskaper hos polymerer och polymerlösningar: basal Flory-Hugginsteori för kemiska potentialen, random flights, elasticitet, kollaps och exkluderad volym.

Kursen innehåller laborationer som illustrerar de olika egenskaper som bidrar till molekylers löslighet, diffusion i gaser samt bestämning av några molekylära egenskaper: däribland dipolmoment och laddning.

Kursens examination

Betygsskala: TH

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

Delmoment

Kod: 0114. **Benämning:** Molekylär växelverkan och dynamik.

Antal högskolepoäng: 7,5. **Betygsskala:** TH.

Kod: 0214. **Benämning:** Laborationer.

Antal högskolepoäng: 0. **Betygsskala:** UG. **Prestationsbedömning:** Laborationerna redovisas skriftligt eller muntligt. För godkänt skall de skriftliga rapporterna vara enkla men korrekta med sedvanlig struktur och innehåll. **Delmomentet omfattar:** Kursen innehåller tre "våta" laborationer och en demonstrationslaboration i datorsimulering.

Antagningsuppgifter

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

Begränsat antal platser: Nej

Kursen överlappar följande kurser: KFKA05, KFKF01

Kurslitteratur

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

Kontaktinfo och övrigt

Kursansvarig: Kristofer Modig, kristofer.modig@bpc.lu.se

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