



LUNDS UNIVERSITET  
Lunds Tekniska Högskola

*Kursplan för*

## **Molekylära drivkrafter 2: Växelverkan och dynamik**

### **Molecular Driving Forces 2: Interactions and Dynamics**

**KFKF01, 7,5 högskolepoäng, G2 (Grundnivå, fördjupad)**

Gäller för: Läsåret 2016/17

Beslutad av: Utbildningsnämnd C

Beslutsdatum: 2016-04-12

#### **Allmänna uppgifter**

Huvudområde: Teknik.

Obligatorisk för: B2, K2

Valfri för: N4-nbm, N4-m, Pi4

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 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 (bio)polymerer, så som kooperativ sekundärstrukturbildning, adsorption, biokatalys och hydrofob interaktion.
- 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.
- Kunna beskriva principerna för några molekylsimuleringsmetoder.

#### *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, sekundärstrukturbildning i proteiner 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.
- Kunna uppskatta effekten av diffusion i biokemiskt relevanta problemställningar, såsom diffusion genom geler och diffusionskontrollerad reaktionskinetik.
- Kunna skriva enkla men fullständiga laborationsredogörelser innehållande numerisk databehandling inklusive konfidensuppskattningar och felfortplantning med hjälp av Monte Carlometoden.

#### *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 (bio)materials makroskopiska egenskaper.

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.

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.
- Numeriska beräknings- och simuleringsmetoder: finita elementmetoden, molekylodynamik-, stokastisk- och Monte Carlosimuleringar.

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:** 0116. **Benämning:** Tentamen.

**Antal högskolepoäng:** 6,5. **Betygsskala:** TH. **Prestationsbedömning:** Skriftlig tentamen.

**Kod:** 0216. **Benämning:** Laborationer och inlämningsuppgift.

**Antal högskolepoäng:** 1. **Betygsskala:** UG. **Prestationsbedömning:** Laborationerna redovisas antingen skriftligt eller muntligt i slutet av laborationen. För godkänt skall de skriftliga rapporterna vara enkla men korrekta med sedvanlig struktur och innehåll. Inlämningsuppgiften redovisas med en skriftlig rapport. **Delmomentet omfattar:** I kursen ingår tre "våta" laborationer, en demonstrationslaboration i datorsimulering samt en obligatorisk inlämningsuppgift.

## Antagningsuppgifter

**Förkunskapskrav:**

- Minst 5 högskolepoäng inom kurserna FMAA01/FMAA05 Endimensionell analys

**Förutsatta förkunskaper:** FMA430 Flerdimensionell analys, FMAA20 Linjär algebra med introduktion till datorhjälpmedel, KFKA05 Molekylära drivkrafter 1: Termodynamik

**Begränsat antal platser:** Nej

**Kursen överlappar följande kurser:** KFK080, KFK090

## 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](mailto:kristofer.modig@bpc.lu.se)

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