



LUNDS UNIVERSITET
Lunds Tekniska Högskola

Kursplan för kalenderåret 2005

MOLEKYLÄR VÄXELVERKAN OCH DYNAMIK KFK090

Molecular Interactions and Dynamics

Antal poäng: 5. **Betygskala:** TH. **Obligatorisk för:** B2, K2, Pi3XBi. **Kursansvarig:** Professor Bengt Jönsson, Bengt.Jonsson@bpc.lu.se, Biofysikalisk kemi. **Rekommenderade förkunskaper:** FMA410 Matematik, endimensionell analys, FMA420 Linjär algebra, KFK080 Termodynamik. **Prestationsbedömning:** Skriftliga deltentamina samt godkända laborationer. **Hemsida:** <http://www.bpc.lu.se/education/kurser>.

Mål

Kursen skall ge grundläggande kunskaper om växelverkan, struktur och dynamik i molekylära system samt förmåga att tillämpa dessa kunskaper på praktiska problem av relevans för kemiteknik och bioteknik.

Innehåll

Kursen består av två delar: Växelverkan och struktur (ca 2/3 av kursen) samt Molekylär dynamik (ca 1/3 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. Vidare visas hur molekylära egenskaper bestämmer de hastighetskonstanter som uppträder i den fenomenologiska reaktionskinetiken.

Litteratur

Atkins, P.W.: Physical Chemistry 7th ed. Oxford University Press 2002. ISBN 0-19-879285-9

Kompendium med kompletterande text samt övningsuppgifter.
Laborationshandledningar.