



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 2021/22

Fakultet: Lunds tekniska högskola

Beslutad av: Programledning B/K

Beslutsdatum: 2021-04-14

Allmänna uppgifter

Huvudområde: Teknik.

Obligatorisk för: B2, K2

Valfri för: N4-nbm, N4-m

Undervisningsspråk: Kursen ges på svenska

Syfte

Kursen avser att ge studenten en god grund för fortsatta studier inom kemisk separation och analys, reaktionsteknik, läkemedelskemi, molekylär bioteknik och nanovetenskap genom att ge insikter i hur intermolekylära interaktioner styr makroskopiska systems statiska och dynamiska egenskaper.

Mål

Kunskap och förståelse

För godkänd kurs skall studenten

1. visa insikt i hur olika molekylära egenskaper ger upphov till den intermolekylära interaktionen och hur dessa styr makroskopiska beteenden, som t.ex. fassetparation, icke-idealitet och lösningsmedelsegenskaper.
2. visa insikt i den molekylära bakgrunden till dynamik i kemiska system, som diffusion och reaktionskinetik.

Färdighet och förmåga

För godkänd kurs skall studenten

1. kunna analysera en frågeställning och utföra relevanta beräkningar med hjälp av de modeller och ekvationer som presenteras i kursen.
2. med hjälp av miniräknare och dator kunna utföra vanliga numeriska operationer.
3. kunna utföra kemiska laborationer på ett noggrant och säkert sätt samt handha vanlig laborativ utrustning.
4. kunna skriva enkla och fullständiga laborationsredogörelser enligt givna instruktioner med korrekt presentation av data och feluppskattningar.

Värderingsförmåga och förhållningssätt

För godkänd kurs skall studenten

1. kunna diskutera vardagsfenomen, så som fassetparation mellan olja och vatten, utifrån kursens innehåll.
2. kunna diskutera biologiskt relevanta frågeställningar utifrån de grundläggande modeller som ges på kursen.
3. 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 samt icke-idealitet med Bragg-Williamsmodellen, däribland destillation, blandningsluckor och fördelningsjämvikter. Specifikt beskrivs även Henrys konstant, aktivitetskoefficienter och fördelningskoefficienter med denna modell.
- Beskrivning av kooperativa processer, t.ex. helixbildning i polymerer.
- Ligandbindningsformalism för kopplade jämvikter och beskrivning av hämning och kooperativitet i t.ex. biomolekyler.
- Klassisk elektrostatik och intermolekylär växelverkan mellan molekyler i dielektriska media, inklusive Gauss lag, Coulombs lag, dipolmoment och dispersionskrafter. Jonsolvatisering (Born-ekvationen) beräkningar med Poisson-Boltzmanns ekvation och Debye-Hückelteori. Kursen behandlar även effekten av dielektriska gränssytor. Detta tillämpas 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. Detta inkluderar effekten av diffusion i biokemiskt relevanta problemställningar, såsom diffusion genom geler och diffusionskontrollerad reaktionskinetik.
- Fundamental beskrivning av reaktionskinetik: aktiveringstillstånd, Eyrings- och Arrhenius ekvationer samt diffusionskontrollerade hastighetskonstanter.
- Numeriska beräknings- och simuleringsmetoder: finita elementmetoden, molekylodynamik-, stokastisk- och Monte Carlosimuleringar.
- Tre laborationer som behandlar (1) fördelningsjämvikt och jonsolvatisering, (2) molekylära egenskaper, som volym, dipolmoment, laddning och polariserbarhet samt (3) gasdiffusion. Minst en fullständig laborationsrapport inklusive statistisk analys och felfortplantning med hjälp av Monte Carlometoden.
- Vid laborationerna tränas spektrofotometrisk absorbansmätning, konduktansmätning, arbete med gastuber samt användning av densimeter och refraktometer.
- En datorlaboration behandlar modellering av destillation och aktivitetsfaktorer med Bragg-Williamsmodellen.
- Numeriska problem, såsom integrering, derivering, ekvationslösning samt passning till rätta linjens ekvation löses både med räknare och dator.

Kursens examination

Betygsskala: TH - (U,3,4,5) - (Underkänd, Tre, Fyra, Fem)

Prestationsbedömning: Skriftlig tentamen, laborationer och en inlämningsuppgift. Slutbetyget baseras på den skriftliga tentamen.

Om så krävs för att en student med varaktig funktionsnedsättning ska ges ett likvärdigt examinationsalternativ jämfört med en student utan funktionsnedsättning, så kan examinator efter samråd med universitetets avdelning för pedagogiskt stöd fatta beslut om alternativ examinationsform för berörd student.

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:** För betyg G skall varje laboration utföras och redovisas enligt anvisningarna, vilket kan innebära skriftligt eller muntligt, på svenska eller engelska. För godkänt skall de skriftliga rapporterna vara enkla men korrekta och koncisa, ha lämplig struktur samt innehålla en relevant diskussion av resultaten. **Delmomentet omfattar:** I kursen ingår tre "våta" laborationer, en demonstrationslaboration i datorsimulering samt en obligatorisk inlämningsuppgift.

Antagningsuppgifter

Förkunskapskrav:

- FMAA05 Endimensionell analys eller FMAB65 Endimensionell analys B1 eller FMAB70 Endimensionell analys B2

Förutsatta förkunskaper: FMAB30 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

Kursansvarig: Pär Söderhjelm, par.soderhjelm@bpc.lu.se

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

Övrig information: Viss undervisning kan komma att ske på engelska. Viss rapportering kan krävas på engelska. I övergången till nya förkunskapskrav kommer kursansvarig att titta på avklarade delmoment i kursen FMAA05 Endimensionell analys. Dock görs denna kontroll manuellt och kan ta något längre tid än den automatiska kontrollen.