



---

FYSIKALISK KEMI AK  
Physical Chemistry, Basic Course

KFK011

Poäng: 9.0 Betygskala: TH Obligatorisk för: K1 Kursansvarig: Peter Sellers.  
Peter.Sellers@fkem2.lth.se

---

Termodynamik och kinetik  
Thermodynamics and kinetics

0194

Poäng: 5.0 Betygskala: UG Undervisningens omfattning: Rekommenderade  
förkunskaper: Analys A och B Prestationsbedömning: Skriftlig tentamen samt godkända  
laborationer.

**Mål:**

Målet är att den studerande ska bli väl förtrogen med den kemiska termodynamikens grunder.

**Innehåll:**

Kursen omfattar reaktionskinetikens grunder samt grundläggande termodynamik med tillämpningar inom kemin. Undervisningen bedrivs i form av föreläsningar och räkneövningar. Repetition av nödvändiga matematiska verktyg inom flervariabelanalysen. Mycket tid ägnas åt att belysa tillämpningar av de termodynamiska sambanden på ett antal praktiska problem. För att stimulera intresset för problemlösning har ett övningstillfälle karaktären av en enkel övningsskrivning vars resultat kan påverka slutbetyget.

Grundbegrepp i klassiskt termodynamik. Tillståndslagar för gaser och undersökning av gasers termodynamiska egenskaper. Termodynamikens första huvudsats, adiabatiska och isoterma processer. Entalpibegreppet. Termodynamikens andra huvudsats.

Entropibegreppet. Begrepp som reversibilitet och jämvikt. Gibbs och Helmholtz fria energi. Värmepumpar. Fasjämvikter i enkomponentsystem. Bestämning av fasomvandlingsentalpier. Flerkomponentsystem. Lösningar, partiella molära storheter, aktiviteter. Kolligativa egenskaper. Termodynamisk beskrivning av destillation.

Termodynamik för kemiska reaktioner. Hur den kemiska jämvikten beror av tryck och temperatur. Reaktionskinetikens grunder, begreppen reaktionsordning och molekylaritet. Hastighetsuttryck för 1:a, 2:a och högre ordningens enkla och sammansatta reaktioner. Hastighetskonstantens temperaturberoende, aktiveringsenergi. Enzymreaktioners kinetik.

**Litteratur:**

## Molekylstruktur

0294

### Molecular Structure

**Poäng:** 4.0 **Betygskala:** UG **Undervisningens omfattning:** Rekommenderade **förkunskaper:** Analys A och B **Prestationsbedömning:** Skriftlig tentamen samt godkända laborationer.

#### Innehåll:

Denna del av kursen omfattar grundläggande kvantkemi och molekylspektroskopi. Undervisningen bedrivs i form av blandade lektioner och övningar. En väsentlig del ägnas åt att bringa insikt i den kvantmekaniska begreppsapparaten. Detta används för att ge en fördjupad kunskap om kemisk bindning och molekylers struktur. Kunskaper i kvantmekanik är också en förutsättning för förståelsen av molekylspektroskopi.

Introduktion av begrepp som operatorer, egenvärden och egenfunktioner, vågfunktioner, superpositionsprincipen, väntevärden, obestämbarhetsprincipen, tunneleffekt, kvantiserade tillstånd, energinivåer, kvantiseringen av rörelsemängdsmomentet samt spinn. Vidare presenteras klotytefunktionerna, lösningarna till Schrödingerekvationen för en endimensionell lådpotential, för den harmoniska oscillatorn, för den stela rotorn och för väteatomen. Atomorbitaler, Pauliprincipen, molekylorbitaler och hybridisering leder fram till beskrivningar av den kemiska bindningen. Variationsprincipen och en kortfattad beskrivning av approximativa kvantkemiska beräkningsmetoder tas upp. Inom molekylspektroskopi presenteras begrepp som urvalsregler, övergångssannolikheter och Franck-Condots princip. Vidare behandlas mikrovågs- och IR-spektroskopi, särskilt tokning av  $^1\text{H}$ NMR spektra, samt spektroskopi i synligt och UV-ljus med fenomen som fluorescens och fosforescens.

#### Litteratur:

Atkins, P.W. : Physical Chemistry, 6th Ed.. Oxford, 1998.  
Räkneövningskompendium.  
Laborationshandledningar.