



## FYSIKALISK KEMI AK

KFK011

### Physical Chemistry, Basic Course

**Poäng:** 9.0 **Betygskala:** TH. **Obligatorisk för:** K1, K2. **Kursansvarig:** Univ lektor Peter Sellers. Peter.Sellers@fkem2.lth.se. **Rekommenderade förkunskaper:** FMA011 Matematik AK.. **Prestationsbedömning:** Slutbetyg erhålles som medelvärde av de båda deltentamensbetygen. **Webbsida:** <http://www.fkem2.lth.se/kurs>

#### Mål:

Göra den studerande väl förtrogen med den kemiska termodynamikens grunder och att bringa insikt i den kvantmekaniska begreppsapparaten.

#### Innehåll:

Se 0196 och 0396 nedan.

#### Litteratur:

Se 0196 och 0396 nedan.

---

## Termodynamik och kinetik

0196

### Thermodynamics and Kinetics

**Poäng:** 5.0 **Betygskala:** UG **Obligatorisk för:** K1. **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. Introduktion till reaktionsmekanismer; steady-state approximationen. Enzymreaktioners kinetik.

**Litteratur:**

Atkins, P.W.: Physical Chemistry, 6th ed, Oxford Univ. Press, 1998.  
Räkneövningskompendium. Laborationshandledningar.

---

## Molekylstruktur

0396

### Molecular Structure

**Poäng:** 4.0 **Betygskala:** UG **Obligatorisk för:** K2. **Prestationsbedömning:** Skriftlig tentamen samt godkända laborationer.

**Mål:**

Kursens mål är att bringa insikt i den kvantmekaniska begreppsapparaten för att ge en fördjupad kunskap om kemisk bindning och molekylers struktur samt en förståelse av molekylspektroskopin.

**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 molekylspektroskopin.

Introduktion av begrepp som operatorer, egenvärden och egenfunktioner, vågfunktioner, superpositionsprincipen, väntevärden, obestämbarhetsprincipen, tunneleffekt, kvantiserade tillstånd, energinivåer, kvantiseringen av rörelsemängdsmomentet samt spinn. Vidare presenteras klotyfefunktionerna, lösningarna till Schrödingerekvationen för en endimensionell lådpotential, för den harmoniska oscillatoren, 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 molekylspektroskopin presenteras begrepp som urvalsregler, övergångssannolikheter och Franck-Condots princip. Vidare behandlas mikrovågs- och IR-spektroskopi, särskilt tolkning av <sup>1</sup>HNMR spektra, samt spektroskopi i synligt och UV-ljus med fenomen som fluorescens och fosforescens. Laserns funktion.

**Litteratur:**

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