



## TERMODYNAMIK OCH YTKEMI

KFK060

### Thermodynamics and Surface Chemistry

**Antal högskolepoäng:** 10,5. **Betygskala:** TH. **Nivå:** G1 (Grundnivå).

**Undervisningsspråk:** Kursen ges på svenska. **Överlappar följande kurs/kurser:** KFKA01.

**Obligatorisk för:** W2. **Kursansvarig:** Jan-Erik Norne, Jan-Erik.Norne@bpc.lu.se och Bengt Jönsson, Bengt.Jonsson@bpc.lu.se, Biofysikalisk kemi. **Förutsatta förkunskaper:** KOO080 eller KOO081 Inledande kemi. **Prestationsbedömning:** Examination sker genom en skriftlig tentamen. För slutbetyg krävs också att kursens fyra obligatoriska laborationer är godkända. **Hemsida:** <http://www.bpc.lu.se/education/kurser>.

#### Syfte

Att ge studenterna en insikt i klassisk termodynamik. Att förmedla en förståelse för de termodynamiska begreppen och teorierna och att öva upp förmågan att lösa problem utifrån denna insikt.

Att ge studenterna en insikt i reaktionskinetikens grunder.

Att ge studenterna en introduktion till yt- och kolloidkemin.

#### Mål

##### *Kunskap och förståelse*

För godkänd kurs skall studenten

- Förstå innebörden av termodynamikens första och andra huvudsatser och kunna utföra beräkningar av energi och entropi vid tillståndsförändringar.
- Förstå begreppen fri energi och kemisk potential och med hjälp av dessa kunna bestämma jämviktstillstånd.
- Behärska termodynamiken för blandningar - i första hand ideala system, men också enkla modeller för icke ideala system. Kunna arbeta med aktiviteter och aktivitetskoefficienter.
- Kunna göra förutsägelser om osmotiskt tryck, kokpunktshöjning och smältpunktssänkning utifrån kunskap om systemets sammansättning.
- Kunna beräkna ångtryck och kokpunkt i tvåkomponentsystem.
- Förstå och göra beräkningar i fasdiagram för två komponenter.
- Förstå den termodynamiska grunden för jämviktsekvationer i kemiska system.
- Känna till och kunna använda några olika experimentella metoder att mäta ytpänning.
- Kunna karakterisera olika typer av ytaktiva ämnen.

- Känna till vad följande begrepp betyder: Miceller, kritisk micell koncentrationen (CMC), flytande kristaller, flotation, adsorptionsisotermer och kolloidal stabilitet.

#### *Färdighet och förmåga*

För godkänd kurs skall studenten

- Behärska beräkningar av tryck, volym och temperatur i gaser, såväl ideala som icke ideala.
- Kunna beräkna fasjämviktens tryck- och temperaturberoende i enkomponentsystem
- Kunna utföra beräkningar av samband mellan jämviktskonstant, koncentration, tryck och temperatur i kemiska jämvikter.
- Ta fram och beräkna hastighetsuttryck för 1:a, 2:a och högre ordningens enkla och sammansatta reaktioner.
- Med hjälp av miniräknare kunna utföra numeriska operationer som derivering, integrering, lösning av ekvationer med implicita variabler samt minstakvadratanpassning av data till polynom.

#### *Värderingsförmåga och förhållningssätt*

För godkänd kurs skall studenten

Värdera giltigheten i de modeller som presenterats i kursen.

### **Innehåll**

Kursen är uppdelad i tre huvudavsnitt:

#### *Termodynamik*

Termodynamikens första och andra huvudsatser. Inre energi, entalpi och entropi. Värmekapacitet. Isotherma, isobara och adiabatiska processer. Värmemaskiner, värmepumpar. Fri energi och kemisk potential. Jämviktskriterier och de termodynamiska förutsättningarna för processers spontanitet. Kemisk jämvikt i homogena system; tryck- och temperaturberoende. Fasjämvikter i enkomponentsystem (smältning, förångning och sublimering). Termodynamik för blandningar i ideala och icke-ideala system; aktivitet och aktivitetsfaktor. Destillation. Osmos. Partiella molära storheter. Kemisk jämvikt i heterogena system.

#### *Reaktionskinetik*

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.

#### *Ytkemi*

Avsnittet syftar till att ge en introduktion till yt- och kolloidkemi, ett område med många tillämpningar inom biologi, grundläggande kemi och kemiteknik.

Vätskeytor: ytspänning (-energi); experimentella metoder att mäta ytspänning. Gibbs adsorptionsisoterm. Ytaktiva ämnen. Miceller; metoder att mäta kritisk micell koncentrationen (CMC). Solubilisering. Filmer; ytvåg. Fenomen vid krökta ytor; Kelvin ekvationen.

Fasta ytor: fysikalisk och kemisk adsorption. Termodynamiken för adsorption. Olika adsorptionsisotermer. Vättningsfenomen.

Flytande kristallina faser: översikt av olika typer av molekyllära system som ger upphov till flytande kristaller. Fasdiagram. Fasstruktur-lamellära, hexagonala, osv.

Egenskaper hos laddade ytskikt; DLVO-teorin.

### **Litteratur**

Atkins, P W: Physical Chemistry, 8th Ed. Oxford 2006. ISBN: 0198700725

Övningskompendium i fysikalisk kemi. Kompendium i Ytkemi.

Laborationshandledningar.