

Kursplan för läsåret 2011/2012
(Genererad 2011-08-31.)

MOLEKYLÄRA DRIVKRAFTER 1: **KFKA05**
TERMODYNAMIK
Molecular Driving Forces 1: Thermodynamics

Antal högskolepoäng: 7,5. **Betygsskala:** TH. **Nivå:** G1 (Grundnivå). **Huvudområde:** Teknik. **Undervisningsspråk:** Kursen ges på svenska. **Överlappar följande kurs/kurser:** KFK080 och KFK090. **Obligatorisk för:** B2. **Kursansvarig:** Kristofer Modig, kristofer.modig@bpc.lu.se, Biofysikalisk kemi. **Förutsatta förkunskaper:** FMA420 Linjär algebra, FMAA01 Endimensionell analys, KOO101 Grundläggande kemi. **Prestationsbedömning:** Examination sker genom en skriftlig tentamen. För slutbetyg krävs också att kursens fyra obligatoriska laborationer är godkända. **Hemsida:** <http://www.cmps.lu.se/bpc/teaching/>.

Syfte

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

Mål

Kunskap och förståelse

För godkänd kurs skall studenten

- Kunna beskriva och förklara centrala begrepp så som entropi, temperatur, värme och energi utifrån molekylära egenskaper.
- Kunna formulera och förklara termodynamikens första och andra huvudsatser och kunna utföra beräkningar av energi och entropi vid tillståndsförändringar.
- Kunna förklara den statistiska bakgrunden till Boltzmanns fördelningslag.
- Kunna definiera och förklara begreppen fri energi och kemisk potential och med hjälp av dessa kunna bestämma jämviktstillstånd.
- Behärska termodynamiken för blandningar och kunna göra förutsägelser om kolligativa egenskaper, så som osmotiskt

tryck, kokpunktshöjning och smältpunktssänkning utifrån kunskap om systemets sammansättning.

- Kunna formulera och förklara den termodynamiska grunden för jämviktsekvationer i kemiska system.

Färdighet och förmåga

För godkänd kurs skall studenten

- Behärska beräkningar av tryck, volym och temperatur i ideala gaser.
- Visa förmåga att både praktiskt och teoretiskt kunna beräkna egenskaper hos fasjämvikter i enkomponentsystem, så som tryck- och temperaturberoende av ångtryck och kokpunkt.
- Visa förmåga att både praktiskt och teoretiskt kunna utföra beräkningar av samband mellan jämviktskonstant, koncentration, tryck och temperatur i kemiska jämvikter.
- Kunna ställa upp och utföra fördelningsberäkningar med hjälp av Boltzmanns fördelningslag.
- Från molekylära parametrar kunna beräkna makroskopiska storheter, så som den inre energin och entropin för en ideal diatomär gas.
- Med hjälp av Bragg-Williamsmodellen kunna modellera olika kännetecknande parametrar för blandningar av två ämnen, så som Henrys konstant, aktivitetskoefficienter, fördelningskoefficienter, osmotiskt tryck och kokpunktsändring.
- Med hjälp av miniräknare kunna utföra numeriska operationer så som derivering, integrering, lösning av ekvationer med implicita variabler samt minstakvadratanpassning av data till polynom.
- Kunna skriva enkla men fullständiga laborationsredogörelser.
- Ha förmåga att värdera giltigheten i de grundläggande termodynamiska modeller som presenterats i kursen, så som ideala gaser, ideala lösningar och Bragg-Williamsmodellen för kondenserade ämnen.

Värderingsförmåga och förhållningssätt

För godkänd kurs skall studenten

- kunna diskutera vardagsfenomen, så som värmeflöden, gasexpansion, underkylning och fasseparation mellan olja och vatten, utifrån enkla men sunda statistisk-termodynamiska resonemang.
- kunna värdera information i omvärlden (t.ex. från media) utifrån termodynamiska resonemang.

Innehåll

- Termodynamiska grundbegrepp som arbete och värme, entropi, entalpi, fri energi och kemisk potential behandlas utifrån ett både molekylärt statistiskt och termodynamiskt perspektiv. Ideala gaser behandlas exakt utifrån den molekylära tillståndssumman.
- Beräkningar på reversibla, irreversibla och adiabatiska processer.

- Kvantitativ behandling av fasjämvikter i enkomponentsystem.
- Kvantitativa beräkningar av samband mellan tryck, temperatur och sammansättning i icke-ideala tvåkomponentsystem med en eller flera faser. Detta innefattar bl.a. begrepp som partiell molär storhet och aktivitet, beräkning av kolligativa egenskaper och molekylär beskrivning av fördelningsjämvikter mellan olje- och vattenfas.
- Termodynamisk och statistisk mekanisk behandling av kemisk jämvikt.
- Kursen behandlar även grunden för stabilitet hos biopolymerer, så som proteiner och DNA.

Litteratur

Dill, K and Bromberg, S: Molecular driving forces. Statistical thermodynamics in Chemistry, Physics, Biology and Nanoscience. 2nd edition. Garland Publishing Inc 2010. ISBN: 9780815344308..