



LUNDS UNIVERSITET  
Lunds Tekniska Högskola

*Kursplan för*

# Molekylära drivkrafter 1: Termodynamik Molecular Driving Forces 1: Thermodynamics

**KFKA05, 7,5 högskolepoäng, G1 (Grundnivå)**

Gäller för: Läsåret 2013/14

Beslutad av: Utbildningsnämnd C

Beslutsdatum: 2013-04-15

## Allmänna uppgifter

Huvudområde: Teknik.

Obligatorisk för: B2

Undervisningsspråk: Kursen ges på svenska

## 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.
- visa grundläggande förståelse för kvantmekanik och hur den beskriver molekylers translation, rotation, vibration och interaktion mellan elektromagnetisk strålning och materia.
- 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 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 förhållningsätt*

För godkänd kurs skall studenten

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

### **Kursinnehåll**

- 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.
- Grundläggande kvantmekanik, innefattande dess postulat samt energinivåer för translation, rotation, vibration och elektroner, med syfte att ge bakgrund till den statistiska mekaniken och spektroskopin.
- 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 och beräkningar av kolligativa egenskaper.
- Termodynamisk och statistisk mekanisk behandling av kemisk jämvikt.
- Kursen behandlar även grunden för stabilitet hos biopolymerer, så som proteiner och DNA.

### **Kursens examination**

**Betygsskala:** TH

**Prestationsbedömning:** Examination sker genom en skriftlig tentamen. För slutbetyg krävs också att kursens fyra obligatoriska laborationer är godkända.

### **Delmoment**

**Kod:** 0113. **Benämning:** Molekylära drivkrafter 1: Termodynamik.

**Antal högskolepoäng:** 7,5. **Betygsskala:** TH.

**Kod:** 0213. **Benämning:** Laborationer.

**Antal högskolepoäng:** 0. **Betygsskala:** UG. **Delmomentet omfattar:** Kursen innehåller tre "våta" laborationer och en datorlaboration.

### **Antagningsuppgifter**

**Förutsatta förkunskaper:** FMA420 Linjär algebra, FMAA01 Endimensionell analys, KOO101 Grundläggande kemi.

**Begränsat antal platser:** Nej

**Kursen överlappar följande kurser:** KFK080, KFK090

### **Kurslitteratur**

- Dill, K and Bromberg, S: Statistical thermodynamics in Chemistry, Physics, Biology and Nanoscience. 2nd edition. Garland Publishing Inc, 2010, ISBN: 9780815344308.
- Kompletterande kompendium, producerat vid avdelningen för Biofysikalisk kemi.

### **Kontaktinfo och övrigt**

**Kursansvarig:** Kristofer Modig, kristofer.modig@bpc.lu.se

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