



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 2015/16

Beslutad av: Utbildningsnämnd C

Beslutsdatum: 2015-04-20

## Allmänna uppgifter

Huvudområde: Teknik.

Obligatorisk för: B2, K2

Valfri för: Pi4

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 och vibration.
- 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 jämviktsstillstånd.
- 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 och dator 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 innehållande numerisk databehandling inklusive konfidensuppskattningar och felfortplantning med hjälp av Monte Carlometoden.

#### *Värderingsförmåga och förhållningssätt*

För godkänd kurs skall studenten

- kunna diskutera vardagsfenomen, så som värmeflöden, gasexpansion och underkylning, utifrån enkla men sunda statistisk-termodynamiska resonemang.
- kunna värdera giltigheten i de grundläggande termodynamiska modeller som presenterats i kursen, så som ideala gaser och ideala lösningar.
- 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 termodynamiken 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 (bio)polymerer.
- Tre laborationer som behandlar kemisk jämvikt, ångbildning och termodynamik i vardagen. Minst en fullständig laborationsrapport inklusive statistisk analys och felfortplantning.
- En datorlaboration behandlar Boltzmanns fördelningslag.

## Kursens examination

**Betygsskala:** TH

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

### Delmoment

**Kod:** 0115. **Benämning:** Tentamen.

**Antal högskolepoäng:** 6,5. **Betygsskala:** TH. **Prestationsbedömning:** Skriftlig tentamen.

**Kod:** 0215. **Benämning:** Laborationer.

**Antal högskolepoäng:** 1. **Betygsskala:** UG. **Prestationsbedömning:** Godkänd rapportering ger betyget G.

**Delmomentet omfattar:** Laborationskursen innehåller tre "våta" laborationer och en datorlaboration.

## Antagningsuppgifter

**Förutsatta förkunskaper:** FMAA05 Endimensionell analys, FMAA20 Linjär algebra med datorhjälpmedel, KOOA15 Grundläggande kemi.

**Begränsat antal platser:** Nej

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

## Kurslitteratur

- Dill, K and Bromberg, S: Molecular Driving Forces, 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/education/>