



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 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 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/>