



LUNDS UNIVERSITET  
Lunds Tekniska Högskola

---

FYSIKALISK KEMI AK

KFK 011

Physical Chemistry, Basic Course

Antal poäng: 9.0.

---

Fysikalisk kemi AK / Termodynamik och kinetik

0194

Thermodynamics and kinetics

Antal poäng: 5.0. Obligatorisk för: K1. Kursansvarig: Peter Sellers  
Peter.Sellers@fkem2.lth.se Prestationsbedömning: Skriftlig tentamen.

#### Målbeskrivning

Målet är att den studerande ska bli väl förtrogen med den kemiska termodynamikens grunder.

#### Innehåll

Kursen omfattar reaktionskinetikens grunder samt grundläggande termodynamik med tillämpningar inom kemin. Undervisningen bedrivs i form av blandade lektioner och räkneövningar. Repetition av nödvändiga matematiska verktyg inom flervariabelanalysen. Mycket tid ägnas åt att belysa tillämpningar av de termodynamiska sambanden på ett antal praktiska problem. Erfarenhetsmässigt har räkneövningarna stor betydelse vid inläring av den kemiska termodynamikens grunder. För att stimulera intresset för problemlösning har ett övningstillfälle karaktären av en enkel övningskrivning vars resultat kan påverka slutbetyget.

Grundbegrepp i klassiskt termodynamik. Tillståndslagar för gaser och undersökning av gasers termodynamiska egenskaper. Termodynamikens första huvudsats, adiabatiska och isoterma processer. Entalpibegreppet. Termodynamikens andra huvudsats. Entropibegreppet. Begrepp som reversibilitet och jämvikt. Gibbs och Helmholtz fria energi. Värmepumpar. Fasjämvikter i enkomponentsystem. Bestämning av fasomvandlingsentalpier. Flerkomponentsystem. Lösningar, partiella molära storheter, aktiviteter. Kolligativa egenskaper. Termodynamisk beskrivning av destillation. Termodynamik för kemiska reaktioner. Hur den kemiska jämvikten beror av tryck och temperatur. Reaktionskinetikens grunder, begreppen reaktionsordning och molekylaritet. Hastighetsuttryck för 1:a, 2:a och högre ordningens enkla och sammansatta reaktioner. Hastighetskonstantens temperaturberoende, aktiveringsenergi. Teorier för kemiska

reaktioners hastighet. Enzymreaktioners kinetik. Adsorptionsisotermer.

### Litteratur

KFK 011 0194 Atkins, P.W.: Physical Chemistry, 6th ed, Oxford Univ. Press, 1998.  
Räkneövningskompendium. Laborationshandledningar.

---

## Fysikalisk kemi AK / Molekylstruktur

0294

### Physical Chemistry/ Molecular structure

**Antal poäng:** 4.0. **Obligatorisk för:** K2. **Kursansvarig:** Jan-Erik Norne jan-erik.norne@fkem2.lth.se **Prestationsbedömning:** Skriftlig tentamen.

### Innehåll

Denna del av kursen omfattar grundläggande kvantkemi och molekylspektroskopi. Undervisningen bedrivs i form av blandade lektioner och övningar. En väsentlig del ägnas åt att bringa insikt i den kvantmekaniska begreppsapparaten. Detta används för att ge en fördjupad kunskap om kemisk bindning och molekylers struktur. Kunskaper i kvantmekanik är också en förutsättning för förståelsen av molekylspektroskopi.

Introduktion av begrepp som operatorer, egenvärden och egenfunktioner, vågfunktioner, superpositionsprincipen, väntevärden, obestämlighetsprincipen, tunneleffekt, kvantiserade tillstånd, energinivåer, kvantiseringen av rörelsemängdsmomentet samt spinn. Vidare presenteras klotyfefunktionerna, lösningarna till Schrödingerekvationen för en endimensionell lådpotential, för den harmoniska oscillatoren, för den stela rotorn och för väteatomen. Atomorbitaler, Pauliprincipen, molekylorbitaler och hybridisering leder fram till beskrivningar av den kemiska bindningen. Variationsprincipen och en kortfattad beskrivning av approximativa kvantkemiska beräkningsmetoder tas upp. Inom molekylspektroskopi presenteras begrepp som urvalsregler, övergångssannolikheter och Franck-Condots princip. Vidare behandlas mikrovågs- och IR-spektroskopi, särskilt tolkning av  $^1\text{H}$ NMR spektra, samt spektroskopi i synligt och UV-ljus med fenomen som fluorescens och fosforescens.

### Litteratur

Atkins, P.W. : Physical Chemistry, 6th Ed.. Oxford, 1998.

Räkneövningskompendium.

Laborationshandledningar.

---