



KD2340 Molekylär termodynamik 7,5 hp

Molecular Thermodynamics

När kurs inte längre ges har student möjlighet att examineras under ytterligare två läsår.

Fastställande

Kursplan för KD2340 gäller från och med HT10

Betygsskala

A, B, C, D, E, FX, F

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Kemi och kemiteknik, Kemiteknik

Särskild behörighet

Tre års studier inom Kemivetenskap på högskolenivå, eller motsvarande kunskaper.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Övergripande mål

Att utveckla grundläggande kunskaper i statistisk termodynamik och dess tillämpningar i kemi och kemiteknik.

Detaljerade mål

Kursen har som mål att studenten efter avslutad kurs ska kunna förklara och redogöra för

- Reella gasers molekylära egenskaper i termer av intermolekylär växelverkan
- Begreppen Boltzmannfördelning, mikrotillstånd, molekylär tillståndssumma och systemtillståndssumma
- Ekvipartitionsprincipen och skillnaden i makroskopiska egenskaper mellan molekyler som uppträder enligt klassisk mekanik respektive kvantmekanik
- Den molekylära tolkningen av de makroskopiska storheterna inre energi och entropi
- Einsteinmodellen för enkla kristaller samt använda sig av denna modell för att beräkna värmekapaciteten för kristallina ämnen.
- Reguljära blandningars molekylära egenskaper samt med hjälp av denna modell kunna förutsäga fassetparation i vätskeblandningar
- Vätskors molekylära egenskaper och begreppet radiell fördelningsfunktion
- Principerna för molekylär simulering med Monte Carlo metoden och Molekyldynamikmetoden
- Enkla makromolekylers molekylära och termodynamiska egenskaper i lösning
- Principerna för neutron-, röntgen- och klassisk ljusspridning samt begreppen strukturfaktor och formfaktor och deras relation till makromolekylers statistisk termodynamiska egenskaper

Studenten ska kunna beräkna

- Translations-, rotations- och vibrationstillståndssumman för en fri mono-, di- och triatomär molekyl
- Termodynamiska tillståndsegenskaper och jämviktskonstanter för ideala gaser från spektroskopiska data

Studenten ska kunna bestämma

- Molekylvikt och gyrationsradie för makromolekyler från statistisk ljusspridningsdata

Kursinnehåll

- Reella gasers molekylära egenskaper
- Boltzmannfördelningen och tillståndssummor

- Ekvipartitionsprincipen
- Statistisk termodynamik för ideala gaser
- Einsteinmodellen för enkla kristaller
- Molekylär tolkning av entropi
- Reguljära blandningar
- Introduktion till statistisk termodynamik för vätskor
- Molekylära simuleringsmetoder
- Enkla makromolekyler molekylära och termodynamiska egenskaper i lösning
- Introduktion till lågvinkel neutron och röntgenspridning samt klassisk ljusspridning

Kurslitteratur

McQuarrie and Simon, Molecular Thermodynamics, University Science Books 1999, ISBN 1-891389-05-X

Examination

- LAB1 - Laborationer, 1,0 hp, betygsskala: P, F
- TEN1 - Tentamen, 6,5 hp, betygsskala: A, B, C, D, E, FX, F

Examinator beslutar, baserat på rekommendation från KTH:s handläggare av stöd till studenter med funktionsnedsättning, om eventuell anpassad examination för studenter med dokumenterad, varaktig funktionsnedsättning.

Examinator får medge annan examinationsform vid omexamination av enstaka studenter.

Övriga krav för slutbetyg

Skriftlig examination (TEN1; 6.5 hp)
Laborationer (LAB1; 1 hp)

Slutbetyget blir det godkända betyget på tentamen när även godkänt betyg erhållits på laborationerna

Etiskt förhållningssätt

- Vid grupparbete har alla i gruppen ansvar för gruppens arbete.
- Vid examination ska varje student ärligt redovisa hjälp som erhållits och källor som använts.

- Vid muntlig examination ska varje student kunna redogöra för hela uppgiften och hela lösningen.