



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 HT13

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Kemi och kemiteknik, Kemiteknik

Särskild behörighet

För programstudenter vid KTH krävs:

Minst 150 högskolepoäng från årskurs 1, 2 och 3 varav minst 110 högskolepoäng från årskurs 1 och 2 samt kandidatexamensarbete måste vara avklarade, inom ett program som innehåller:

75 högskolepoäng (hp) inom kemi eller kemiteknik, 20 hp matematik och 6 hp programmering eller motsvarande.

För fristående studerande krävs:

75 högskolepoäng inom kemi eller kemiteknik, 20 hp matematik och 6 hp programmering eller motsvarande, samt dokumenterade kunskaper i engelska motsvarande Engelska B.

Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

Lärandemål

Termodynamikens främsta styrka ligger i dess generalitet vilket gör att den anses tillhöra de fundamentala delarna av kemi. De flesta kurser i termodynamik undviker dock att behandla den mikroskopiska och molekylära bakgrunden till de mekanismer som förklaras av termodynamiken. I den här kursen avser vi att åtgärda denna brist, och utveckla de grundläggande kunskaper i statistisk termodynamik som krävs för att förstå de krafter som påverkar molekyler och förutsäga deras kombinerade beteende i fysiska, kemiska och biologiska system.

Kursen har som mål att studenten efter avslutad kurs ska kunna (under förutsättning att man aktivt deltar och närvarar vid föreläsningar och övningar):

- beskriva och tillämpa sannolikhetslärans principer för att förutsäga molekylers beteende.
- beskriva och förklara begreppen Boltzmanns fördelningslag, molekylära partitionsfunktioner samt partitionsfunktionen hos ett system.
- beräkna vissa makroskopiska egenskaper från atomära och molekylära strukturer med hjälp av statistisk mekanik.
- beskriva den molekylära tolkningen av makroskopiska egenskaper såsom energi, entropi, temperatur och värmekapacitet.
- beräkna kemiska jämviktsreaktioner i gasfas från atomära strukturer.
- beskriva och förklara fasjämvikter baserade på begreppet kemisk potential.
- beskriva molekylära egenskaper hos vanliga blandningar och förutsäga fassetparation i vätskeblandningar.
- analysera fysikaliska kinetikfenomen i termer av "icke-jämvikts" statistisk mekanik.
- förutsäga, med hjälp av ett statistisk termodynamiskt tillvägagångssätt, hur hastigheten av en kemisk reaktion beror på de involverade molekylära strukturerna.
- kombinera lagar från elektrostatis och termodynamisk jämvikt (dvs. Poisson-Boltzmanns ekvation) för att förutsäga jämvikter i lösningar innehållande laddade ämnen.
- beskriva de intermolekylära växelverkningsarna som håller vätskor och fasta ämnen samman.
- tolka fasdiagram med hjälp av termer för statistisk termodynamik.
- beskriva processerna för bindning och adsorption till en yta.
- beskriva anomala termodynamiska egenskaper hos vatten och beskriva ursprunget av den hydrofoba effekten.
- förklara de molekylära termodynamiska egenskaperna för enkla makromolekyler i lösning.

Kursinnehåll

- Sannolikhetslära.
- Boltzmanns fördelningslag.
- Statistisk mekanik för enkla gaser och fasta ämnen samt molekylär tolkning av temper-

atur och värmekapacitet.

- Kemiska- och fasjämvikter.
- Lösningar, blandningar och överföring av molekyler mellan faserna.
- Fysisk (dvs. diffusion, genomträngning och flöde) och kemisk kinetik.
- Elektrostatik: Coulombs lag, elektrostatisk potential och elektrokemisk jämvikt.
- Intermolekylära växelverkningar och fasövergångar.
- Adsorption, bindning och katalys.
- Termodynamiska egenskaper hos vatten.
- Introduktion till termodynamik för polymerlösningar.

Kursupplägg

Kursen kommer att ges genom föreläsningar och handledning. Åhörarkopior från föreläsningarna kommer att delas ut kontinuerligt och behandla de ämnen som diskuteras i klassrummet. Praktisk handledning kommer att komplettera föreläsningarna och en stor del av tiden kommer att spenderas med att lösa problem och svara på frågor. Föreläsningarna kommer att följa kursboken.

Kurslitteratur

Ken A. Dill and Sarina Bromberg, *Molecular Driving Forces*, 2nd Edition, Garland Science. ISBN 978-0-8153-4430-8. Additional material will be provided during the course.

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

Slutbetyget baseras på tentamensbetyget.

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.

