



# KD2340 Molekylär termodynamik 7,5 hp

Molecular Thermodynamics

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

## Fastställande

Skolchef vid CBH-skolan har 2023-06-12 beslutat att fastställa denna kursplan att gälla från och med VT 2024, diarienummer: C-2023-1227.

## Betygsskala

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

## Utbildningsnivå

Avancerad nivå

## Huvudområden

Kemi och kemiteknik, Kemiteknik

## Särskild behörighet

Kandidatexamen inom ett program som innehåller: 75 högskolepoäng (hp) inom kemi eller kemiteknik, 20 hp matematik och 6 hp programmering eller motsvarande.

## Undervisningsspråk

Undervisningsspråk anges i kurstillfällesinformationen i kurs- och programkatalogen.

# Lärandemål

Efter kursen skall studenten kunna:

- Redogöra i detalj för mikroskopiska modeller och grundläggande relationer för både entropi- och entalpitermer som tillsammans bestämmer fria energin för olika molekyllära system.
- Använda den resulterande formalismen och koncepten för att beskriva och förklara makroskopiskt beteende i olika material och system.

# Kursinnehåll

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 molekyllära 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.

Under kursen kommer följande områden att diskuteras:

- Sannolikhetslära.
- Boltzmanns fördelningslag.
- Statistisk mekanik för enkla gaser och fasta ämnen samt molekyllär tolkningar av temperatur 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.
- Intermolekyllära växelverkningar och fasövergångar.
- Adsorption, bindning och katalys.
- Termodynamiska egenskaper hos vatten.
- Introduktion till termodynamik för polymerlösningar.

Avsikten med kursen är att studenten efter avslutad kurs ska ha lärt sig att (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, molekyllära partitionsfunktioner samt partitionsfunktionen hos ett system.
- Beräkna vissa makroskopiska egenskaper från atomära och molekyllära strukturer med hjälp av statistisk mekanik.
- Beskriva den molekyllära 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 faseparation i vätskeblandningar.
- Analysera fysikaliska kinetikfenomen i termer av "icke-jämvikts" statistisk mekanik.
- Förutsäga, med hjälp av ett statistisk termodynamiskt tillvägagångssätt, hur hastigheten av en kemiskreaktion beror på de involverade molekylära strukturerna.
- Kombinera lagar från elektrostatik 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.

## Examination

- TEN2 - Skriftlig tentamen, 7,5 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.