



KD2340 Molekylär termodynamik 7,5 hp

Molecular Thermodynamics

Fastställande

Kursplan för KD2340 gäller från och med VT20

Betygsskala

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

Utbildningsnivå

Avancerad nivå

Huvudområden

Kemiteknik, Kemi och kemiteknik

Särskild behörighet

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.

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 molekyllära 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 kemiskreaktion beror på de involverade molekyllära strukturerna.
- Kombinera lagar från elektrostatik och termodynamisk jämvikt (dvs. Poisson-Boltzmanns ekvation) för att förutsäga jämvikter i lösningar innehållande laddade ämnen.
- Beskriva de intermolekyllära växelverkningarna 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 molekyllära termodynamiska egenskaperna för enkla makromolekyler i lösning.

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

- 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 enskilda studenter.

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

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.