

**KEMM38, Kemi: Statistisk termodynamik och
molekylsimulering, 7,5 högskolepoäng**
Chemistry: Statistical Thermodynamics and Molecular Simulation,
7.5 credits
Avancerad nivå / Second Cycle

Fastställande

Kursplanen är en historisk, äldre version, faställd av Naturvetenskapliga fakultetens utbildningsnämnd 2016-08-11 och gällde från och med 2017-01-01, vårterminen 2017.

Allmänna uppgifter

Kursen är en valbar kurs på avancerad nivå för en naturvetenskaplig masterexamen med huvudområde kemi och en obligatorisk kurs för en naturvetenskaplig masterexamen med huvudområde nanokemi.

Vid behov ges kursen i sin helhet på engelska.

Huvudområde

Kemi

Nanokemi

Fördjupning

A1N, Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

A1N, Avancerad nivå, har endast kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

Kursens mål

Kursens mål är att ge grundläggande kunskaper om statistisk mekanik. Ett viktigt mål med kursen är att ge en fördjupad förståelse för begreppet entropi och därmed överbrygga motsättningen mellan en mikroskopisk ansats (statistisk mekanik) och en makroskopisk (termodynamik).

Kunskap och förståelse

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- redogöra för och applicera statistisk-mekaniska principer på ensembler av molekyler

- beskriva sambandet mellan statistisk mekanik och termodynamik.

Färdighet och förmåga

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- tillämpa numeriska metoder såsom Molekyldynamik och Metropolis Monte Carlo
- använda statistisk mekaniska verktyg för att med, såväl som utan, hjälp av datorprogram beräkna egenskaper hos makroskopiska system.

Värderingsförmåga och förhållningssätt

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- tolka resultat från numeriska beräkningar, samt bedöma felkällor
- beskriva och återge approximativa statistisk-mekaniska teorier för vätskor och lösningar, samt kunna värdera approximationer och bedöma begränsningar.

Kursens innehåll

Föreläsningar: Kursen startar med introduktion av grundläggande statistisk-mekaniska begrepp. Termodynamiska transformationer jämförs med motsvarande ensembler inom den statistiska mekaniken. Approximativa teorier för vätskor och lösningar. Simuleringsmetoder.

Räkneövningar där färdigheter i att använda de olika statistisk-mekaniska verktygen och resonemangen tränas upp.

Föreläsningar och övningar omfattar 6 hp.

Laborationer och inlämningsuppgifter, 1,5 hp.

Kursens genomförande

Undervisningen består av föreläsningar och räkneövningar. Under kursens gång genomförs också obligatoriska inlämningsuppgifter och laborationer, vilka redovisas skriftligt.

Kursens examination

Kursen examineras med en skriftlig tentamen samt obligatoriska moment. För studerande som ej godkänts vid ordinarie tentamen erbjuds ytterligare tentamenstillfällen i nära anslutning härtill.

Betyg

Betygsskalan omfattar betygsgraderna Underkänd, Godkänd, Väl godkänd. För godkänt betyg på hela kursen krävs godkänd tentamen och godkända obligatoriska moment.

Betyg på tentamen är Underkänd, Godkänd och Väl godkänd. Betyg på obligatoriska moment är Underkänd och Godkänd.

Slutbetyget på kursen avgörs av tentamensresultatet.

Förkunskapskrav

För tillträde till kursen krävs grundläggande behörighet, Engelska 6 samt 90 högskolepoäng (hp) avklarade naturvetenskapliga kurser inklusive godkända kurser motsvarande:

- KEMA10 Allmän kemi, 7,5 hp, KEMA01 Organisk kemi – grundkurs, 7,5 hp, KEMA12 Oorganisk kemi – grundkurs, 7,5 hp, och KEMA03 Biokemi – grundkurs, 7,5 hp

samt

- KEMB09 Fysikalisk kemi – grundkurs, 15 hp,
- KEMB08 Molekylär växelverkan och struktur, 15 hp, och
- MATA02 Matematik för naturvetare, 15 hp, eller motsvarande

Tillträdeskraven är uppfyllda även för den som har grundläggande behörighet, Engelska 6, samt godkända kurser motsvarande:

- 75 hp fysik inklusive: FYSC11 Atom- och molekylfysik, 7,5 hp, och FYSC13 Fasta tillståndets fysik, 7,5 hp

samt

- 30 hp matematik

Motsvarande förkunskaper, som inhämtats på annat sätt, ger också tillträde till kursen.

Övrigt

Kursen kan inte tillgodoräknas i examen tillsammans med KEMM18 Statistisk termodynamik, 7,5 hp.