



LUNDS
UNIVERSITET

Naturvetenskapliga fakulteten

**KEMM48, Kemi: Statistisk termodynamik och
molekylsimulering, 7,5 högskolepoäng**
*Chemistry: Statistical Thermodynamics and Molecular Simulation,
7.5 credits*
Avancerad nivå / Second Cycle

Fastställande

Kursplanen är fastställd av Naturvetenskapliga fakultetens utbildningsnämnd 2019-01-22 att gälla från och med 2019-01-22, höstterminen 2019.

Allmänna uppgifter

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

Undervisningsspråk: Engelska

Huvudområde

Nanokemi

Kemi

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 studenten ska tillägna sig grundläggande kunskaper om statistisk mekanik. Ett viktigt mål med kursen är att studenten ska tillägna sig 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

- beskriva approximativa statistisk-mekaniska teorier för vätskor och lösningar

Färdighet och förmåga

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

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

Värderingsförmåga och förhållningssätt

Efter avslutad kurs ska studenten kunna:

- utvärdera resultat från numeriska beräkningar samt bedöma felkällor
- värdera och bedöma approximationer och dessas begränsningar

Kursens innehåll

Föreläsningar och räkneövningar (6 hp): Kursen inleds med introduktion av grundläggande statistisk-mekaniska begrepp. Termodynamiska transformationer jämförs med motsvarande ensembler inom den statistiska mekaniken. Approximativa teorier för vätskor och lösningar. Simuleringsmetoder. Räkneövningarna genomförs för träning i att använda de olika statistisk-mekaniska verktygen och resonemangen.

Laborationer och inlämningsuppgifter (1,5 hp).

Kursens genomförande

Undervisningen utgörs av föreläsningar, räkneövningar, laborationer och inlämningsuppgifter. Laborationerna och inlämningsuppgifterna samt tillhörande moment är obligatoriska.

Kursens examination

Examinationen sker skriftligt i form av tentamen vid kursens slut samt genom obligatoriska moment under kursens gång.

För studerande som ej godkänts vid ordinarie tentamen erbjuds ytterligare tentamenstillfällen i nära anslutning härtill.

Om så krävs för att en student med varaktig funktionsnedsättning ska ges ett likvärdigt examinationsalternativ jämfört med en student utan funktionsnedsättning, så kan examinator efter samråd med universitetets avdelning för pedagogiskt stöd fatta beslut om alternativ examinationsform för berörd student.

Provmoment för denna kurs finns i en bilaga i slutet av dokumentet.

Betyg

Betygsskalan omfattar betygsgraderna Underkänd, Godkänd, Väl godkänd. För att bli godkänd på hela kursen krävs godkänd tentamen samt godkända obligatoriska moment.

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

Slutbetyget avgörs genom betyg på tentamen.

Förkunskapskrav

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

- KEMA20 Allmän kemi 15 hp, eller KEMA10 Allmän kemi 7,5 och KEMA12 Oorganisk kemi – grundkurs 7,5 hp, KEMA01 Organisk kemi – grundkurs 7,5 hp, och KEMA03 Biokemi – grundkurs 7,5 hp,
- KEMB09 Fysikalisk kemi – grundkurs 15 hp,
- 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
- 30 hp matematik

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

Övrigt

Kursen kan inte tillgodoräknas i examen tillsammans med KEMM38 Statistisk termodynamik och molekylsimulering 7,5 hp.

Prov/moment för kursen KEMM48, Kemi: Statistisk termodynamik och molekylsimulering

Gäller från H19

- 1901 Statistisk termodynamik och molekylsimulering, 6,0 hp
Betygsskala: Underkänd, Godkänd, Väl godkänd
- 1902 Statistisk termodynamik och molekylsimulering, obl. moment, 1,5 hp
Betygsskala: Underkänd, Godkänd