



INSTITUTIONEN FÖR KEMI OCH MOLEKYLÄRBIOLOGI

KEM040 Fysikalisk kemi, 15 högskolepoäng

Physical Chemistry, 15 credits

Grundnivå / First Cycle

Fastställande

Kursplanen är fastställd av Institutionen för kemi och molekylärbiologi 2017-09-25 och senast reviderad 2017-10-03. Den reviderade kursplanen gäller från och med 2017-10-03, höstterminen 2017.

Utbildningsområde: Naturvetenskapligt 100 %

Ansvarig institution: Institutionen för kemi och molekylärbiologi

Inplacering

Kursen är inplacerad på nivån 30-60 högskolepoäng för kandidatexamen och kan dessutom läsas som fristående kurs. Kursen ersätter kurs KEN040 och kurserna kan inte tillgodoräknas samtidigt i en examen.

Kursen kan ingå i följande program: 1) Organisk kemi och läkemedelskemi, masterprogram (N2KEL), 2) Lärarprogrammet (L1LÄR), 3) Kemi och lärande, masterprogram (N2KOL), 4) Läkemedelskemi, kandidatprogram (N1LMK), 5) Kemi, masterprogram (N2KEM) och 6) Kemi, kandidatprogram (N1KEM)

Huvudområde

Kemi

Kemi med inriktning mot
läkemedelskemi

Fördjupning

G1F, Grundnivå, har mindre än 60 hp
kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

G1F, Grundnivå, har mindre än 60 hp
kurs/er på grundnivå som förkunskapskrav

Förkunskapskrav

För tillträde till kursen krävs godkänt resultat på kurs KEM011, Grundläggande kemi 1 (15 hp) eller motsvarande kunskaper. Genomgången kurs Naturvetarmatematik A1 (15 hp), kurskod MMGK11 eller motsvarande kunskaper rekommenderas starkt.

Lärandemål

Efter godkänd kurs ska studenten kunna:

Kunskap och förståelse

- **avgöra** när kvantmekaniskt grundad eller klassisk mekanisk problemlösning är tillämpligt vid fysikalkemiska problemställningar,
- **förklara** begreppen
 - partikel-i-lådan, harmonisk oscillator och molekylär rotor,
 - Hückel-, linear combination of atomic orbitals (LCAO)-, valensbindnings (VB)- och molekylorbital (MO)-modellerna,
 - entropi och spontanitet i ett kemiskt förlopp,
 - Boltzmannfördelningen och kanoniska tillståndssumman,
 - resonans på atomär och molekylär nivå,
 - sambanden mellan vågtal, våglängd och frekvens,
 - absorbans och emission (dvs. fluorescens, fosforescens, spontan emission, och stimulerad emission),
- **redogöra** för
 - de molekylära drivkrafter och egenskaper som bestämmer riktning och jämviktsläget av en kemisk reaktion,
 - spektroskopiska mätmetoder i molekylära termer.

Färdigheter och förmåga

- **analysera** problem samt **utföra** beräkningar inom områdena
 - kvantmekanik och spektroskopi med fokus på molekylär translation, vibration och rotation samt elektronstruktur och bindningsmekanismer i atomer och molekyler,
 - termodynamik och statistisk mekanik med fokus på gaser, vätskor och lösningar i jämvikt med hjälp av termodynamikens huvudsatser,
 - kemisk kinetik med fokus på reaktionshastigheter,
- **definiera** molekylers geometri och fysikaliska egenskaper utgående från elementär kvantkemi,
- **genomföra** fysikalkemiska mätningar samt tolka resultaten ur ett molekylärt perspektiv.

Värderingsförmåga och förhållningssätt

- **reflektera** över och **diskutera** fysikalkemiska frågeställningar utifrån vetenskapligt grundad förståelse av atomära och molekylära processer,

- **argumentera** för fysikalkemiskt grundade sakframställningar av problem kopplade till ett miljömässigt hållbart samhälle och hållbar utveckling.

Kursen är hållbarhetsrelaterad, vilket innebär att minst ett av kursens lärandemål tydligt visar att kursens innehåll uppfyller minst ett av Göteborgs universitets fastställda kriterier för hållbarhetsmärkning.

Innehåll

Kvantmekanik

- Kvantisering av ljus och partikelrörelse. Vågpartikel-dualitet. Osäkerhetsprincipen.
- Schrödingerekvationen: partikeln i lådan, harmonisk oscillator, stel rotor, tunnling.
- Kvalitativ kvantmekanik.

Kvantkemi

- Väteliknande system, större atomer.
- Lewisstrukturer, VSEPR och VBmodeller för molekyler.
- Jonisk och kovalent kemisk bindning. Molekylorbitaler som linjärkombination av atomorbitaler.
- Vättemolekyljonen, vättemolekylen, eten och större molekyler.
- Elektronstrukturberäkningar, särskilt Hückelteori för plana konjugerade kolvätemolekyler.

Spektroskopi

- Spektroskopins principer, egenskaper hos ljus, samt koppling till kvantiserade tillstånd hos atomer och molekyler. Absorption, spridning och emission. Tolkning av spektrum.
- Vibrationsspektroskopi med utgångspunkt ur den harmoniska oscillatoren för diatomära molekyler. Urvalsregler, anharmonicitet samt normalmoder för enklare polyatomära molekyler.
- Rotationspektroskopi, med koppling till rotationsrörelse hos enkla molekyler. Kopplingar av vibrations och rotationsrörelse.
- Elektroniska övergångar och optisk spektroskopi. Begreppen fluorescens och fosforescens. Principen för lasring. Linjebreddning och begreppet quenching.
- Relaterade spektroskopiska tekniker och Ramanspridning.

Statistisk mekanik

- Mikrotillstånd, ensembler, Boltzmannfördelningen, tillståndssumma.
- Inre energi, entropi, fri energi, värmekapaciteter och jämviktskonstanter beräknade ur tillståndssummor.
- Ideala och reala gaser.

Termodynamik

- Energi i form av arbete och värme enligt första huvudsatsen.
- Entropi och fri energi enligt andra huvudsatsen.
- Flerkomponentsystem, blandningar och lösningar.
- Kemisk potential, ickeideala system, aktivitet, jonlösningar, fasjämvikt, kemisk jämvikt.
- Flerfasset system och fasövergångar.
- Elektrokemi.

Kinetik

- Kinetisk gasteori, transportegenskaper, rörelse i vätskor, diffusion.
- Reaktionsordningar, Arrheniusekvationen, reaktionsmekanismer.
- Kollisionsteori, transition-state-teori, dynamik.

Delkurser

1. **Teoridel** (*Theory part*), 9 hp
Betygsskala: Väl godkänd (VG), Godkänd (G) och Underkänd (U)
2. **Laborationer** (*Laboratory exercises*), 6 hp
Betygsskala: Godkänd (G) och Underkänd (U)

Former för undervisning

Delkurs 1: Föreläsningar, räkneövningar och/eller räknestugor och hemuppgifter.

Delkurs 2: Laborationer.

Undervisningsspråk: svenska och engelska

Kursen ges som huvudregel på svenska men kan ges helt eller delvis på engelska om omständigheterna påkallar det.

Former för bedömning

Delkurs 1: Kunskapskontroll sker genom skriftlig salstentamen.

Delkurs 2: Kunskapskontroll sker baserat på aktivt deltagande i laborationerna och genom labbrapporter,

Om student som underkänts två gånger på samma examinerande moment önskar byte av examinator inför nästa examinationstillfälle, ska sådan begäran inlämnas skriftligt till kursansvarig institution och bifallas om det inte finns särskilda skäl däremot (HF 6 kap § 22).

I det fall en kurs har upphört eller genomgått större förändringar ska studenten i normalfallet garanteras tillgång till minst tre provtillfällen (inklusive ordinarie provtillfälle) under en tid av åtminstone ett år med utgångspunkt i kursens tidigare uppläggning.

Betyg

På kursen ges något av betygen Väl godkänd (VG), Godkänd (G) och Underkänd (U).

Delkurs 1: För betyg G krävs 50% av den maximala poängsumman i tentamen. För betyg VG krävs 75% av den maximala poängsumman i tentamen.

Delkurs 2: För betyg G krävs genomförande av och godkända labbrapporter för samtliga laborationer.

Slutbetyg: För betyg G på hela kursen krävs betyg G på båda delkurser. För betyg VG på hela kursen krävs betyg VG på delkurs 1 och betyg G på delkurs 2.

Angående tillämpning av ECTS-skalan för betyg var god se Rektors beslut 2007-05-28, dnr G 8 1976/07.

Kursvärdering

Kursvärdering görs i relation till kursens lärandemål och innehåll och genomförs i slutet av kursen genom en individuell skriftlig enkät på Göteborgs universitets lärplattform. Student som deltar i eller har avslutat en kurs ska ges möjlighet att anonymt framföra erfarenheter av och synpunkter på kursen i en kursvärdering. En sammanställning av kursvärderingen och kursansvarig lärarens reflektion ska tillgängliggöras för studenterna inom rimlig tid efter kursslut.