

Kunskapskrav på tentamen KFKA05

Det här är främst en lista över kunskaps- och färdighetskrav för att nå godkänt (betyg 3) på KFKA05 Molekylära drivkrafter 1: Termodynamik, tillsammans med konkreta exempel på hur kraven testas på en tentamen. Jämfört med de officiella kursmålen är denna lista mer detaljerad och därför mer praktiskt användbar. Längst ner står även några riktlinjer för högre betyg

Krav för att nå betyg 3 på tentamen

Grundläggande definitioner och relationer

Studenten ska

- förstå centrala termodynamiska begrepp och storheter, som jämvikt, ångtryck, entropi, entalpi och fri energi.
- kunna analysera en praktisk frågeställning, göra rimliga antaganden och välja rätt beräkningsmodeller för att lösa problemet.
- kunna avgöra rimligheten i de svar som erhålls under problemlösning.

Egenskaper för gaser

Studenten ska

- vara säker på de grundläggande egenskaperna hos en ideal gas och vad dessa betyder termodynamiskt (t.ex. att frånvaron av interaktioner gör att inre energin inte beror på trycket).
- kunna förklara vad som händer när en gas kondenserar, och vad som ska vara uppfyllt för att det ska ske.
- förstå begreppet partialtryck och dess koppling till molbråket för en gasblandning, samt kunna göra enkla beräkningar på gasblandningar.

Första huvudsatsen

Studenten ska

- kunna skriva upp första huvudsatsen och veta vad termerna (värmets och arbetet) i den betyder.
- kunna diskutera och räkna på processer utifrån första huvudsatsen.
- kunna beräkna arbetet vid processer under konstant tryck.

- kunna beräkna värmets vid processer under konstant volym eller tryck.
- kunna förstå och tolka begreppen *isoterm*, *adiabatisk*, *isochor*, *isobarisk*, *reversibel* och *irreversibel* samt veta hur dessa utnyttjas vid beräkning av differentiella samband (t.ex. att $dU = dw$ för adiabatisk process, att $dU = C_V dT$ för isochor process eller att $dU = 0$ för isoterm expansion av en ideal gas).
- kunna beräkna termodynamiska storheter (q , w , ΔU och ΔS) för isoterm expansion/kompression av ideal gas, såväl reversibel som irreversibel.
- kunna göra kvalitativa förutsägelser om vad som händer vid adiabatiska processer samt kunna beräkna termodynamiska storheter (q , w , ΔU och ΔS) för adiabatisk reversibel expansion/kompression av ideal gas.
- kunna och förstå nyttan med definitionen av entalpi.

Andra huvudsatsen

Studenten ska

- förstå definitionerna av temperatur, tryck och kemisk potential som olika derivator av entropin.
- kunna resonera kvalitativt om möjliga och omöjliga processer utifrån termodynamikens andra huvudsats
- förstå den klassiska definitionen av entropi, $dS = dq_{\text{rev}}/T$ och kunna använda den i praktiska beräkningar.
- kunna ange kriterier för processers spontanitet i (1) isolerade system (2) system under konstant tryck (eller volym) och temperatur, samt applicera dessa kriterier.
- kunna och förstå nyttan med definitionerna av Helmholtz och Gibbs energier och kemisk potential.

Grundläggande termodynamiska manipulationer

Studenten ska

- kunna utnyttja att S , U , H etc är tillståndsfunktioner för att dela upp komplicerade processer i beräkningsbara delsteg (t.ex. för att beräkna entalpiändringen för ett ämne över ett temperaturintervall som inkluderar fasövergångar).
- kunna enkelt manipulera och integrera de differentiella sambanden enligt nedanstående förtydligande:
 - Studenten ska kunna utföra en beräkning för en förändring mellan två tillstånd där en eller flera tillståndsvariabler (T , p , V eller n) ändrats.

- Studenten vet t.ex. att "isoterm" betyder $dT = 0$ och "isobar" betyder $dp = 0$. *Exempel:* differentialen dS ger $\Delta S = C_p \ln(T_2/T_1)$ om T ändras från T_1 till T_2 under isobara förhållanden och om C_p kan ansättas vara konstant.
- Studenten får aldrig skriva att $\Delta H = C_p dT$, att $dT = (293 - 273) \text{ K}$ eller andra liknande obehagligheter.
- Det är tillräckligt att studenten kan hantera ideala gaser samt de fall där α , κ_T , π_T och μ_{JT} är temperaturoberoende *men*
- studenten kan beräkna hur H , S och G ändras med temperaturen även då C_p ändras med temperaturen enligt något givet samband.
- kunna skriva upp hur kemiska potentialen beror av koncentrationen i gaser, blandningar och fasta ämnen samt välja rätt standardtillstånd beroende på om ämnet i blandningen är utspädd eller inte.
- kunna ställa upp och beräkna längs en termodynamisk cykel (t.ex. för beräkning av ångbildningsentalpin vid någon annan temperatur än kokpunkten).
- kunna ställa upp och lösa enkla värmemaskiner där något av q_H , q_C eller w är givet samt konstanta temperaturer T_H och T_C är givna.
- kunna slå upp relevanta storheter i kursens tabellsamling.

Kvantmekanik och statistisk mekanik

Studenten ska

- känna till och kunna använda Boltzmanns entropidefinition $S = k_B \ln W$ för enkla beräkningar av blandning och tryckändring med hjälp av Stirlings formel.
- känna till och kunna använda den statistiska entropidefinitionen $S = -k_B \sum p_i \ln p_i$ för enkla beräkningar av S över en given sannolikhetsfördelning $\{p_1, p_2, \dots, p_t\}$.
- känna till de fyra grundläggande energilagringsmoderna (translation, rotation, vibration och elektron) i system av oberoende molekyler.
- kunna beräkna energier för translation (partikeln i lådan), rotation och vibration samt kunna de relativa storleksordningarna för dessa energier.
- kunna beräkna energin $h\nu$ för en foton samt vilken frekvens en foton behöver ha för att excitera en molekyl mellan två givna energinivåer.
- kunna använda Boltzmanns fördelningslag för att uppskatta (relativa) sannolikheten för ett energitillstånd.
- förstå bakgrunden till Boltzmanns fördelningslag (dvs att det är entropiskt ogynnsamt att ge en molekyl mycket hög energi).
- kunna beräkna antalet translations-, rotations- och vibrationsfrihetsgrader i valfri molekyl.

- kunna relatera kanoniska tillståndssumman Q till den molekylära tillståndssumman q och dess faktorer q_{trans} , q_{vib} , q_{rot} och q_{el} för ideala gaser.
- kunna beräkna q_{trans} , q_{vib} , q_{rot} och q_{el} för ideala gaser givet data i kursens tabellsamling.
- ha en intuitiv förståelse av vad molekylära tillståndssumman betyder, vad den kan användas till samt ha en uppfattning om dess typiska storlek för de fyra energilagringsmodernerna.
- kunna beräkna $U(T) - U(0)$, C_p och C_V av ideala gaser i de olika enkla temperaturgränserna, dvs när $\theta_{\text{rot}} \ll T \ll \theta_{\text{vib}}$ eller $T > \theta_{\text{vib}}$.

Enkomponentsystem

Studenten ska

- kunna pricka in faserna (s), (l) och (g) i ett Tp -fasdiagram samt veta vad faslinjerna, trippelpunkten och kritiska punkten betyder.
- beskriva hur ett system ser ut i en given punkt i ett Tp -fasdiagram samt kunna beskriva hur det förändras längs en "resa" i fasdiagrammet.
- veta vad som menas med smältpunkt och kokpunkt (för ett givet tryck).
- veta vilka ekvationer som används för att beräkna faslinjerna samt principen för hur de används.
- kunna använda Clausius–Clapeyrons ekvation för att beräkna nya punkter på faslinjerna.
- veta relationen mellan $\Delta_{\alpha \rightarrow \beta} S$ och $\Delta_{\alpha \rightarrow \beta} H$ för fasövergången $\alpha \rightarrow \beta$ då denna sker reversibelt (t.ex. vid normala kokpunkten).

Blandningar

Studenten ska

- med säkerhet kunna teckna molbråket för ett ämne i en blandning samt kunna göra omvandlingar mellan viktsprocent och molbråk.
- förstå begreppet partiell molär volym och veta hur denna beräknas för ämne i från data för $V(n_i)$.
- veta när begreppen "ideal lösning" och "idealt utspädd" skall användas.
- förstå hur och varför den kemiska potentialen ändras med koncentrationen för ett ämne i en ideal lösning.
- med säkerhet skilja på betydelsen av begreppen "ideal gas" och "ideal lösning".
- kunna använda Raoult och Henrys lagar för att beräkna ångtrycket över en blandning från sammansättningen och vice versa.

- förstå begreppen *aktivitet* och *aktivitetsfaktorer* samt veta hur dessa är relaterade till ångtrycket över ett ämne i en blandning.
- kunna avgöra om smältpunkt och kokpunkt ökar eller minskar vid tillsats av främmande ämne, förklara varför ändringen sker samt beräkna förändringen för en ideal blandning.
- förstå uppkomsten av osmotiskt tryck, korrekt identifiera storheterna i ekvationen för osmotiskt tryck samt utföra beräkning av osmotiska trycket för en ideal blandning.

Kemisk jämvikt

Studenten ska

- känna till begreppet standardtillstånd och veta de vanligast använda standardtillstånden för gas, fast ämne, vätska och löst ämne.
- med säkerhet kunna teckna den (heterogena) termodynamiska jämviktskontanten K och använda rätt uttryck för aktiviteten för förekommande faser.
- med säkerhet kunna relatera den termodynamiska jämviktskonstanten K till ändringen i fri energi.
- kunna skilja på betydelserna av $\Delta_r \mu = \Delta_r G$ och $\Delta_r \mu^\ominus = \Delta_r G^\ominus$ samt reaktionkvoten Q och jämviktskonstanten K .
- förstå betydelsen av orden "exoterm" och "endoterm" samt veta hur K beror av temperaturen i det ena eller andra fallet.
- kunna avgöra om en jämviktssammansättning i gasfas är tryckberoende eller inte utifrån reaktionens stökiometri.
- nyttja Le Chateliers princip för att avgöra hur en jämviktssammansättning ändras med mängd, tryck och temperatur.
- Kunna relatera $\Delta_r H^\ominus$, $\Delta_r S^\ominus$ och $\Delta_r G^\ominus$ till varandra samt beräkna hur $\Delta_r G^\ominus$ ändras med temperaturen i fallet $\Delta_r C_p^\ominus = 0$.

Tillämpad matematisk färdighet

Studenten ska

- kunna ställa upp Clausius–Clapeyrons och van't Hoffs ekvationer i linjär form (under antagandet att ΔH är T -oberoende) och utföra linjär regression på miniräknaren för att bestämma termodynamiska storheter.
- kunna använda numerisk ekvationslösning ("Solver") på räknaren för att t.ex. med säkerhet hantera adiabatiska förändringar av en ideal gas.
- kunna utföra numerisk integration på räknaren ("fnInt") för att t.ex. kunna beräkna $H(T)$ med temperaturberoende C_p .
- kunna använda listor i räknaren för att effektivt beräkna många värden på en gång (t.ex. i samband med användning av linjär regression).

Krav för betygen 4 och 5

Generellt krävs för högre betyg att studenten

- visar en djupare förståelse av alla begrepp som krävs för betyget 3.
- kan genomföra resonemang och beräkningar i flera steg.
- kan avgöra vilken information som är relevant för att lösa ett givet problem.
- självständigt kan göra rimliga approximationer.
- visar utökad färdighet och säkerhet i att hantera beräkningarna matematiskt.

Exempel på detta kan vara (observera att listan är på intet vis uttömmande):

- kombinera differentiella samband och integrera dem med korrekt hantering av start- och sluttillstånd. Detta kan gälla alla delar av kursen, t.ex. adiabatiska processer för ideal gas, volymsändringar för vätskor, $T(p)$ för fasjämvikter etc.
- nyttja Maxwellrelationer för att finna nya samband och integrera dem.
- kunna beräkna C_V med statistisk mekanik även i områden utanför de enkla temperaturgränserna samt kunna beräkna $S(T)$ för mono- och diatomära ideala gaser.
- utnyttja definitioner och ekvationer för att härleda nya samband som kan användas för att beräkna det som efterfrågas.
- lite djupare förståelse av kvantmekaniken, t.ex. kunna skriva upp sambandet mellan vågfunktionen och sannolikheten att hitta en partikel i ett givet område (Borns tolkning) och kunna beräkna sannolikheten att finna en partikel området.
- kunna beräkna $K(T)$ och $\Delta_r G^\ominus$ även för fall där $\Delta_r C_p^\ominus \neq 0$ eller är temperaturberoende.
- själv kunna linjärisera samband (som inte nödvändigtvis gjorts tidigare på kursen), utföra linjär regression på miniräknaren och sedan tolka vad regressionsparametrarna betyder.
- kunna hantera miniräknaren på ett något mer avancerat sätt, t.ex. kunna kombinera "Solver" med "fnInt" och derivera numeriskt.
- kombinera olika delar av termodynamiken för att lösa mer avancerade problem.
- tydligt definiera vilka antaganden man gör och under vilka förutsättningar de gäller
- resonera om giltigheten för de modeller man använder.
- diskutera fördelar och nackdelar med olika tillämpningar av termodynamik.

För högre betyg ser tentamensuppgifterna ungefär ut som för tidigare tentor (se extentor på <http://www.cmps.lu.se/bpc/education/kfka05/>). Dock kan något fler teorifrågor förekomma för att betona de "resonerande" kunskapskraven. I högrebetygsdelen av tentamen finns följande förtydligande av vilka krav som ställs på lösningarna:

Observera att här normalt endast ges delpoäng för lösningar som kommit ett stort steg närmare det efterfrågade resultatet, och då endast om studenten kan motivera hur en framkomlig väg ser ut. Alla slutsatser skall motiveras och beräkningar redovisas. Tag för vana att alltid göra en rimlighetsbedömning.