**Fysikalsk kjemi III Statistisk termodynamikk for kjemi**

**Kort om emnet**

Emnet gir en grundig innføring i statistisk termodynamikk og dens anvendelser innen kjemi biokjemi og materialvitenskap. Grunnlaget for Boltzmanns fordelingslov blir behandlet, og det vil bli vist hvordan de mikroskopiske tilstandene bestemmer de makroskopiske egenskapene av systemet. Vi vil gjennomgå begreper som entropi, entalpi og fri energi fra den klassiske termodynamikken og utlede disse med utgangspunkt i mikrotilstandene til systemets komponenter og vekselvirkninger mellom disse. Vi vil bruke dette til å gi fundamental innsikt og belyse problemstillinger innenfor fagfelt som for eksempel materialkjemi, biokjemi, polymerkjemi, løsningers kjemi og atmosfærekjemi. Viktige temaer som vil bli gjennomgått vil være molekylære vekselvirkninger, kjemisk kinetikk, molekylær transport og diffusjon, kooperativitet og (meso)faseoverganger, protein-folding, selvorganisering (self-assembly) av amfifile molekyler, membran- og micelledannelse samt egenskaper ved makromolekyler.

**Hva lærer du?**

Etter å ha fullført emnet

* forstår du sammenhengen mellom de termodynamiske potensialene (entropi, energi, Gibbs energi og Helmholtz energi) og underliggende statistiske variasjoner på atomært og molekylært nivå
* kan du beskrive den grunnleggende fysikken i molekyler og ensembler av molekyler
* kan du bruke statistisk-mekaniske betraktningsmåter til å beskrive den termodynamiske tilstanden av gasser, væsker, makromolekyler og faste stoffer
* kan du gjøre rede for kjemisk endring ved hjelp av statistisk termodynamikk (reaksjoner, faseoverganger)
* kan du beskrive samvirkende prosesser i (bio)kjemi ved hjelp av statistisk termodynamikk.
* Har du kjennskap til noen utvalgte tematiske emner: ligandbinding, allosteri, proteinfolding, prosesser ved grensesnittet mellom materialer og løsninger, polymerdynamikk

**Undervisning**

Undervisningen vil bestå av forelesninger, hjemmeoppgaver og seminarer. Seminarene vil bli gitt i form av "flipped-classroom”, og det forventes aktiv studentdeltagelse i form av oppgaveløsing på tavla etc. i seminarene. Studentene må levere rapporter i forbindelse med seminaroppgavene.

**Eksamen**

Hjemmeeksamen og avsluttende muntlig eksamen.

Hjemmeeksamen: Studentene får en praktisk oppgave som de må levere en skriftlig rapport om innen tre uker.

Avsluttende muntlig eksamen: Vil omhandle både rapporten og innholdet i kurset.

Hjemmeeksamen og avsluttende muntlig eksamen utgjør hver 50% av sluttresultatet.

**Anbefalte forkunnskaper**

KJM1130 – Fysikalsk kjemi I - termodynamikk og kinetikk – KJM2600 – Fysikalsk kjemi II - kvantekjemi og spektroskopi

**Overlappende emner**

4 studiepoeng overlapp mot FYS2160 – Termodynamikk og statistisk fysikk

------------

*Forsøksvis ukeplan basert på andre utgave av Dill og Bromberg: Molecular Driving Forces.*

Uke 1- Innledning (kap 1, 2, 3 og 4 kursorisk)

* Sannsynlighetsfunksjoner
* Faserommet (x,p)
* Bevaringslover og konservative krefter
* Lagranges ubestemte multiplikatorer

Uke 2- Entropi og energi (kap 5 og 6)

* Boltzmanns definisjon
* Prinsippet om maksimum entropi
* De termodynamiske potensialene
* Fundamentalligningene (rep. fra KJM1130)

Uke 3- Boltzmanns fordelingslov (kap 10)

* Sannsynlighetsfordelinger
* Partisjonsfunksjonen

Uke 4-Statmek for gasser og faste stoffer, partisjonsfunksjoner (kap. 11)

* Partikkel i boks-translasjon
* Harmonisk vibrasjon
* Rotasjon
* Elektoniske frihetsgrader, degenerasjon
* Ekvipartisjonsprinsippet

Uke 5-Temperatur og likevekt, gittermodellen (kap 12 og 13)

* Hva er temperatur?
* Varmekapasitet (rep fra KJM1130)
* Drivkraften for varmeveksling
* Kjemisk likevekt og partisjonsfunksjoner

Uke 6-Løsninger og blandinger (kap 14 og 15)

* Kjemisk potensial (delvis rep. KJM1130)
* Overflatespenning
* Gittermodellen
* Grenseflatespenning

Uke 7-Diffusjon og strømning (kap 17)

* Ficks lov (rep KJM1130)
* Konsentrasjonbsgradienter i rom og tid
* Smoluchowski og Einstein-Smoluchowski
* Onsagers resiproke relasjoner

Uke 8-Makroskopisk dynamikk (kap 18)

Uke 9-Kjemisk kinetikk (kap 19)

* TST
* Detaljert likevekt (detailed balance)

TEMATISK EMNER (valgfritt, 3 kap. hvert år)

Uke 10-12- Intermolekylære vekselvirkninger (kap. 24)

Uke 13- Faseoverganger (kap. 25)

Uke 14- Kooperativitet (kap 26)

Uke 15- Vann (kap 30 og 31)

Uke 16- Polymerløsninger og elastisitet (kap 32 og 33)