



# UNIVERSITÀ DI PAVIA

Anno Accademico 2014/2015

## FONDAMENTI DI CHIMICA FISICA E LABORATORIO -MOD. 1

<b>Anno immatricolazione</b>	2013/2014
<b>Anno offerta</b>	2014/2015
<b>Normativa</b>	DM270
<b>SSD</b>	CHIM/02 (CHIMICA FISICA)
<b>Dipartimento</b>	DIPARTIMENTO DI CHIMICA
<b>Corso di studio</b>	CHIMICA
<b>Curriculum</b>	TECNOLOGICO-APPLICATIVO
<b>Anno di corso</b>	2°
<b>Periodo didattico</b>	Primo Semestre (01/10/2014 - 20/01/2015)
<b>Crediti</b>	9
<b>Ore</b>	72 ore di attività frontale
<b>Lingua insegnamento</b>	ITALIANO
<b>Tipo esame</b>	ORALE
<b>Docente</b>	BERBENNI VITTORIO - 6 CFU MUSTARELLI PIERCARLO - 3 CFU
<b>Prerequisiti</b>	Concetti base acquisiti nei corsi di Chimica generale ed Inorganica, Matematica e Fisica.
<b>Obiettivi formativi</b>	<p>Studio dei tre principi della termodinamica e conoscenza delle principali funzioni di stato: la energia interna, l'entalpia, l'entropia e le energie libere di Gibbs e Helmholtz. Lo studente sarà così in grado di:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1) utilizzare i dati di entalpia standard di formazione per eseguire calcoli di entalpia di reazioni chimiche anche in funzione della temperatura;</li><li>2) utilizzare i dati di entropia assoluta standard per eseguire calcoli di entropia di reazione anche in funzione della temperatura;</li><li>3) Calcolo della costante di equilibrio di una reazione chimica anche in funzione della temperatura.</li></ol> <p>Studio dell'equilibrio di fase in sistemi a uno e due componenti e della regola delle fasi. Lo studente sarà in grado di leggere i principali tipi di diagrammi di fase in sistemi a due componenti sia liquido-vapore che</p>

liquido-solido.

Le proprietà termodinamiche delle soluzioni: i volumi molari parziali, il potenziale chimico.

Proprietà colligative delle soluzioni.

Soluzioni ideali (la legge di Raoult) e soluzioni reali: il calcolo del coefficiente di attività

Conoscenza della origine della meccanica quantistica. Familiarizzazione con il formalismo della equazione di Schroedinger ed utilizzo dei diversi operatori. Dalle soluzioni della equazione di Schroedinger per l'atomo di idrogeno agli orbitali.

#### Programma e contenuti

Il primo principio della termodinamica: calore e lavoro. Le funzioni di stato energia interna ed entalpia. La loro relazione. Termochimica: entalpia di formazione. Entalpia integrale di dissoluzione. Dipendenza della entalpia di reazione dalla temperatura. Calorimetria: la branca sperimentale della termochimica. Classificazione dei calorimetri: in base al modo di operazione ed al principio di funzionamento. Il secondo principio della termodinamica: la funzione entropia come indicatore della spontaneità di un processo. Espressione della entropia assoluta di una sostanza secondo il terzo principio della termodinamica. Dalla funzione entropia alla funzione energia libera (di Gibbs e di Helmholtz). L'equilibrio chimico. Dipendenza della costante di equilibrio di una reazione chimica da pressione e temperatura. Calcolo della costante di equilibrio. Esercizi numerici. L'equilibrio di fase in sistemi a un componente: la equazione di Clapeyron e di Clausius Clapeyron. La regola delle fasi. L'equilibrio di fase in sistemi a due componenti: equilibrio liquido-vapore a pressione ed a temperatura costante. Equilibrio solido-liquido: i principali tipi di diagrammi di fase e la loro interpretazione. Le miscele liquide ideali e reali: la attività ed il coefficiente di attività. I volumi molari parziali. Le proprietà colligative. Esercizi numerici I limiti della fisica classica; introduzione alla meccanica quantistica; relazioni materia-energia; lo spettro elettromagnetico; spettroscopia rotazionale, vibrazionale ed elettronica. Applicazioni allo studio dei materiali. Calorimetria: calore associato ai diversi processi chimici e tecniche per determinarlo: esercizi numerici. Elettrochimica: la conducibilità elettrica in soluzione acquosa, le leggi di Kohlrausch, la mobilità degli ioni, i numeri di trasporto e metodi per determinarli. Utilizzo di dati elettrochimici per la determinazione di grandezze termodinamiche (costanti di equilibrio e prodotti di solubilità). L'attività e i coefficienti di attività di ioni in soluzione acquosa. La legge limite di Debye-Huckel. Cinetica: cinetiche di semplici reazioni chimiche in fase omogenea, determinazione dell'ordine di reazione e della costante cinetica. Cinetiche complesse: l'approssimazione dello stato stazionario, la cinetica di reazioni enzimatiche, a catena ed esplosive.

#### Metodi didattici

Tutti gli argomenti verranno affrontati con lezioni frontali affiancate da un congruo numero di esercizi numerici ed esercitazioni pratiche.

#### Testi di riferimento

Peter Atkins- Julio de Paula "Chimica Fisica" (V ed. italiana condotta sulla IX ed. inglese)  
Casa Editrice Zanichelli

	Appunti integrativi e testi di esercizi forniti dal docente per e-mail
<b>Modalità verifica apprendimento</b>	esame scritto ed orale
<b>Altre informazioni</b>	esame scritto ed orale
<b>Obiettivi Agenda 2030 per lo sviluppo sostenibile</b>	<a href="#"><u>\$ibl legenda sviluppo sostenibile</u></a>