



Principali informazioni sull'insegnamento	
Denominazione dell'insegnamento	Chimica Fisica
Corso di studio	Chimica e Tecnologia Farmaceutiche LM-13
Anno di corso	Secondo Anno
Crediti formativi universitari (CFU) / European Credit Transfer and Accumulation System (ECTS):	: 8
SSD	CHIM/02- Chimica Fisica
Lingua di erogazione	Italiano
Anno Accademico	2022-2023
Periodo di erogazione	Primo Semestre
Obbligo di frequenza	La frequenza è obbligatoria

Docente	
Nome e cognome	Lucia Catucci
Indirizzo mail	lucia.catucci@uniba.it
Telefono	080-5442055
Sede	Dipartimento di Chimica
Sede virtuale	<i>Piattaforma Microsoft Teams, codice corso yp8dfcv</i>
Ricevimento (giorni, orari e modalità)	Su appuntamento, da concordare via e-mail

Syllabus	
Obiettivi formativi	Il corso intende fornire agli studenti i fondamenti della termodinamica, della cinetica chimica e della spettroscopia molecolare con lo scopo di trasmettere le conoscenze e gli strumenti necessari per affrontare e risolvere problematiche inerenti alla chimica fisica.
Prerequisiti	Conoscenze di base di Chimica Generale ed Inorganica, Matematica e Fisica
Contenuti di insegnamento (Programma)	<p>Principi di Termodinamica, Cinetica Chimica e Spettroscopia</p> <p>Programma:</p> <p>1.0 Le proprietà dei gas.</p> <p>1.1 Equazione di stato dei gas perfetti.</p> <p>1.2 Teoria cinetica dei gas:</p> <p>1.3 Gas reali. Equazione di stato viriale. Legge di Van der Waals.</p> <p>2.0 Termodinamica chimica.</p> <p>2.1 Introduzione. Definizione di sistema, ambiente, variabili o funzioni termodinamiche. Stati di equilibrio e trasformazioni termodinamiche. Calore e Lavoro. Calorimetria.</p> <p>2.2 Il primo principio. Energia interna. Capacità termica e calore specifico.</p> <p>2.3 Entalpia. Entalpia delle trasformazioni fisiche, atomiche e molecolari. Termochimica. Legge di Hess. Entalpia standard di formazione. Variazione dell'entalpia con la temperatura: legge di Kirchhoff.</p> <p>2.4 Secondo principio. Enunciati. Trasformazioni spontanee. Reversibilità e irreversibilità.</p> <p>2.5 Entropia. Definizione termodinamica. Disuguaglianza di Clausius. Trasformazioni adiabatiche. Cicli termodinamici. Teorema e ciclo di Carnot. Cicli refrigeranti. Entropia di una transizione di stato. Variazione dell'entropia con la temperatura. Entropia assoluta.</p> <p>2.6 Terzo principio. Teorema di Nernst. Relazione di Boltzmann.</p>



2.7 Energia di Helmholtz ed energia di Gibbs. Funzione lavoro massimo. Energia libera di reazione. Equazione fondamentale della termodinamica. Relazioni di Maxwell. Equazione di stato termodinamica. Variazione dell'energia di Gibbs con la pressione e con la temperatura. Equazione di Gibbs-Helmholtz. Fugacità ed attività. Grandezze molari parziali. Potenziale chimico. Criterio termodinamico dell'equilibrio. Equazione di Clapeyron. Energia di Gibbs di mescolamento. Quoziente di reazione e costante di equilibrio. Principio di Le Chatelier. Equazione di Van't Hoff.

3.0 Proprietà delle soluzioni.

3.1 Proprietà colligative.

3.2 Solubilità.

3.3 Ripartizione di un soluto tra liquidi immiscibili..

4.0 Equilibri di fase.

4.1 Diagrammi di stato delle miscele. Sistemi a due componenti e diagrammi temperatura-composizione. Sistemi solido-liquido: diagrammi con eutettico; soluzioni solide. Diagrammi di stato liquido-liquido per sistemi a due componenti parzialmente miscibili. Diagrammi di stato liquido-vapore per miscele di liquidi volatili: distillazione semplice e frazionata; azeotropi; distillazione di liquidi immiscibili.

5.0 Sistemi dispersi: Colloidi e tensioattivi.

5.1 Forze di coesione. Interazioni molecolari. Tensione superficiale.

5.2 Colloidi: definizione e proprietà. Effetto Tyndall. Colloidi: classificazione. Coagulazione e flocculazione.

5.4 Tensioattivi: classificazione. Micelle e liposomi. Interazione idrofoba. Membrane biologiche. Cristalli liquidi.

6.0 Cinetica chimica.

6.1 Velocità di reazione, costanti di velocità e leggi cinetiche. Ordine di reazione. Leggi cinetiche in forma integrata. Reazioni di ordine 0, del I, II e n ordine. Pseudo-ordine. Tempo di dimezzamento. Moleolarità delle reazioni. Reazioni elementari e non elementari. Cinetiche delle reazioni di equilibrio, delle reazioni consecutive e competitive.

6.2 Dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura. Equazione di Arrhenius.. Teoria delle collisioni. Teoria del complesso attivato e dello stato di transizione. La catalisi. Catalizzatori omogenei ed eterogenei. Gli enzimi e la catalisi enzimatica.

7.0 Teoria quantistica

7.1 Fallimenti della meccanica classica. Radiazione del corpo nero. Capacità termica a bassa temperatura: relazione di Debye. Effetto fotoelettrico. Dualismo onda-particella: relazione di De Broglie. Funzioni d'onda. Equazione di Schrödinger. Interpretazione di Born. Principio di indeterminazione di Heisenberg.

8.0 Struttura atomica e molecolare.

8.1 Spettri e struttura degli atomi idrogenoidi. Numeri quantici. Funzioni d'onda e orbitali.

8.2 Lo spin. Regole di selezione. Principio di esclusione di Pauli. Regola di Hund.

8.3 Legame chimico. Teoria del legame di valenza. Orbitali ibridi. Risonanza.

8.4 Teoria degli orbitali molecolari. Metodo LCAO

9.0 Spettroscopia molecolare.

9.1 Aspetti generali. Spettroscopia rotazionale, vibrazionale ed elettronica.

Fluorescenza e fosforescenza. Principi di Risonanza Magnetica Nucleare.



Testi di riferimento	P.W. Atkins, J.De Paula. Elementi di Chimica Fisica , Zanichelli, Bologna P.W. Atkins Chimica Fisica (terza edizione italiana) Zanichelli
Note ai testi di riferimento	Sito web della Casa Editrice

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
200	70	10	120
CFU/ETCS			
8	7	1	

Metodi didattici	Il corso prevede lezioni frontali con il supporto di presentazioni PowerPoint (che saranno disponibili su teams) ed esercitazioni in aula
-------------------------	---

Risultati di apprendimento previsti	
Conoscenza e capacità di comprensione	<ul style="list-style-type: none">○ Conoscenza e comprensione dei principi della termodinamica della spettroscopia e della cinetica chimica
Conoscenza e capacità di comprensione applicate	<ul style="list-style-type: none">○ Acquisizione di procedure metodologiche per applicazioni della termodinamica, spettroscopia e della cinetica chimica per determinazioni qualitative, quantitative, strutturali e di velocità di reazione
Competenze trasversali	<ul style="list-style-type: none">• <i>Autonomia di giudizio</i><ul style="list-style-type: none">○ Acquisizione di autonomia nella valutazione e interpretazione di dati sperimentali e nell'impostazione delle strategie di applicazione delle nozioni studiate in ambito termodinamico, spettroscopico e cinetico• <i>Abilità comunicative</i><ul style="list-style-type: none">○ Capacità di comunicare in forma scritta e orale, in italiano ed in inglese, anche con utilizzo di sistemi multimediali.• <i>Capacità di apprendere in modo autonomo</i><ul style="list-style-type: none">○ Capacità di recuperare agevolmente le informazioni dalla letteratura, banche dati ed internet.

Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	Esame scritto e orale su tutti gli argomenti del programma.
Criteri di valutazione	<ul style="list-style-type: none">• <i>Conoscenza e capacità di comprensione:</i> Lo studente deve dimostrare di aver acquisito i concetti fondamentali della termodinamica, cinetica chimica e spettroscopia per raggiungere le competenze necessarie per lo studio delle discipline previste dal corso di laurea.• <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate:</i> Lo studente deve essere in grado di applicare le conoscenze chimico fisiche nella soluzione degli esercizi proposti.• <i>Autonomia di giudizio:</i> Lo studente dovrà dimostrare di padroneggiare i principi chimico fisici di base



	<p>acquisiti.</p> <ul style="list-style-type: none">• <i>Abilità comunicative:</i> Lo studente deve sapersi esprimere in forma scritta e orale, in modo chiaro e rigoroso.• <i>Capacità di apprendere:</i> Lo studente deve dimostrare di aver acquisito in maniera critica le nozioni fondamentali e di essere in grado di individuare interconnessioni ed applicazioni dei concetti acquisiti a contesti reali.
Criteria di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale	<p>L'esame prevede una prova scritta ed una orale. Si potrà accedere alla prova orale solo se si supera la prova scritta A determinare il voto finale contribuiscono entrambe le prove. Oltre all'accertamento dell'acquisizione delle nozioni viene valutata l'autonomia di giudizio e la capacità di argomentazione ed esposizione. Il voto finale è attribuito in trentesimi. L'esame si intende superato quando il voto è maggiore o uguale a 18.</p>
Altro	