| **Principali informazioni sull'insegnamento** | |
|---|---|
| Titolo insegnamento | CHIMICA FISICA |
| Corso di studio | SCIENZA DEI MATERIALI |
| Crediti formativi | 4+2 |
| Denominazione inglese | PHYSICAL CHEMISTRY |
| Obbligo di frequenza | SI |
| Lingua di erogazione | ITALIANO |

| **Docente responsabile** | Fabio Mavelli | fabio.mavelli@uniba.it |
|---|---|---|

| **Dettaglio crediti formativi** | Ambito disciplinare | SSD | Crediti |
|---|---|---|---|
| | Caratterizzante | CHIM/03 | 6 |

| **Modalità di erogazione** | Periodo di erogazione | Anno di corso | Modalità di erogazione |
|---|---|---|---|
| | 2° semestre | 1° | Lezioni frontali (32h)<br>Laboratorio (30h) |

| **Organizzazione della didattica** | Ore totali | Ore di corso | Ore di studio individuale |
|---|---|---|---|
| | 150 | 64 | 86 |

| **Calendario** | Inizio attività didattiche | Fine attività didattiche |
|---|---|---|
| | 01.03.2018 | 23.06.2018 |

| **Syllabus** | |
|---|---|
| Prerequisiti | Fondamenti di Analisi Matematica e Cenni Calcolo differenziale. Rudimenti di programmazione e calcolo in Matlab |
| Risultati di apprendimento previsti<br>(declinare rispetto ai Descrittori di Dublino) (si raccomanda che siano coerenti con i risultati di apprendimento del CdS, riportati nei quadri A4a, A4b e A4c della SUA, compreso i risultati di apprendimento trasversali) | • *Conoscenza e capacità di comprensione*<br>conoscenza degli aspetti di base delle chimica fisica applicata ai materiali.<br>• *Conoscenza e capacità di comprensione applicate*<br>capacità di calcolare autonomamente dai dati tabulati proprietà termodinamiche di interesse in condizioni standard a non standard,<br>capacità di derivare matematicamente proprietà termodinamiche dalle legge fondamentali<br>• *Autonomia di giudizio*<br>capacità di valutazione degli errori commessi nelle procedure di misura di proprietà chimica fisiche.<br>• *Abilità comunicative*<br>Capacità di scrivere una breve relazione di laboratorio nel formato di un articolo scientifico<br>• *Capacità di apprendere*<br>Sviluppo dell'approccio scientifico alla studio dei fenomeni naturali |
| Contenuti in breve | Leggi della Chimica-Fisica applicate ai fenomeni naturali ed ai materiali. |
| **Programma in dettaglio** | **Lezione 1- Principi di Termodinamica Classica.**<br>Sistema termodinamico: classificazione, sistema idrostatico. Grandezze di stato estensive ed intensive. Scale di temperatura, fattori di conversione. Equilibrio termodinamico e grandezze di stato. Equazione di stato, equazione di stato del Gas Ideale. Trasformazioni di stato e trasformazioni di equilibrio. |

| | |
|---|---|
| | Trasformazioni reversibili. Funzioni di stato e differenziali esatti. Miscele di gas ideali: legge di Dalton.<br>Gas Reali: deviazioni dal comportamento ideale. Equazione di van der Waals. Diagramma di Andrews e parametri critici.<br>**Lezione 2 – Il Primo principio .**<br>Scambi di energia fra sistema ed ambiente: calore e lavoro, convenzioni. Lavoro di volume. Lavoro reversibile ed irreversibile. Flusso di calore reversibile ed irreversibile. Il calore ed il lavoro non sono funzioni di stato. Principio zero della termodinamica. Termometri: a gas e a liquido. Capacità termica a pressione e a volume costante. Calori specifici. Il I Principio della termodinamica: L'energia interna E è una funzione di stato. Differenziale dell'energia per sistemi a composizione costante e variabile. Forme differenziali esatte. Equivalenza calore e lavoro. Conservazione dell'energia. Limiti del I principio.<br>Entalpia funzione di stato. Differenziale dell'entalpia. Calore scambiato a volume e pressione costante. Relazione fra Cp e Cv. Relazione di Mayer.<br>**Lezione 3 – Coefficiente di Joule-Thomson e Volumi parziali molari.**<br>Espansione libera di un gas. Energia interna ed entalpia di un gas ideale. Gas reali: coefficiente di Joule-Thompson. Grandezze intensive ed estensive: funzioni omogenee di grado 0 e 1. I volumi parziali molari.<br>**Lezione 4 – Termochimica.**<br>Calore di reazione ed equazione termochimica. Entalpia di reazione $\Delta H_R$ ed Energia di reazione $\Delta E_R$. Calorimetria. Relazione fra $\Delta H_R$ e $\Delta E_R$. Reazioni chimiche: equazione stechiometrica e grado di avanzamento. Calcolo del $\Delta H_R$ a partire dalle entalpie parziali molari e dal grado di avanzamento. Stato standard. Entalpie standard di formazione $\Delta H^{\varnothing}_f$ tabulate. Legge di Hess. Calcolo dell'entalpia di reazione standard a partire dalle $\Delta H^{\varnothing}_f$ tabulate. Legge di Kirchhoff. Calcolo dell'entalpia di reazione standard ad una temperatura differente da quella dei dati tabulati.<br>**Lezione 5 – II Secondo Principio**.<br>$dS=Q_{rev}/T$ differenziale esatto. Entropia come funzione di stato. Processi Spontanei e variazione di entropia: flusso di calore reversibile ed irreversibile. II principio: $\Delta S_{Univ}$ criterio di spontaneità, disuguaglianza di Clausius. Macchine termiche ed enunciato di Kelvin-Plank. II Terzo Principio della termodinamica. Calcolo delle entropie standard S delle sostanze pure in condizioni standard. Entalpia di reazione $\Delta S_R$. Variazione di $\Delta S_R$ con la temperatura.<br>**Lezione 6 – Energia Libera.**<br>Energia libere di Helmholtz e Gibbs: principi di spontaneità ed equilibrio. Contributo entalpico ed entropico al $\Delta$GR per le reazioni spontanee: temperatura di inversione.<br>$\Delta G^{\varnothing}$f di formazione standard e calcolo dei $\Delta G^{\varnothing}_R$ di reazione standard. $\Delta G_R$ in condizioni non standard. Variazione di G del sistema durante una reazione chimica. Lavoro massimo e lavoro utile.<br>**Lezione 7 – Trasformazioni di Legendre e costante di equilibrio.**<br>Equazione fondamentale della termodinamica. Trasformazioni di Legendre e differenziali delle funzione termodinamiche per sistemi a composizione costante: variabili naturali. Equazioni di Maxwell.<br>Variazione di G con la pressione: gas ideale e specie in fase condensata. |

| | |
|---|---|
| | Variazione di G con la temperatura. Variazione del $\Delta G_R$ di reazione con la temperatura: equazione di Gibbs-Helmholtz. Stima del $\Delta G_R$ ad una temperatura differente da quella del $\Delta G_R$ tabulato. $\Delta G_R$ di reazione per specie in fase gassosa in condizioni non standard. Quoziente termodinamico per una reazione chimica e Costante di equilibrio. Attività delle specie chimiche. Dipendenza della costante di equilibrio dalla temperatura: Equazione di van't Hoff.<br>**Lezione 8 – Potenziale Chimico.**<br>Equazione fondamentale per sistemi a composizione variabile. Differenziali di H, G, F per sistemi a composizione variabile. Potenziale chimico e Energia libera molare G°. Equazione di Gibbs-Duhem. Variazione del potenziale chimico come criterio di spontaneità ed equilibrio. Potenziale chimico di un gas ideale e reale. Determinazione coefficiente di attività. Attività per composti non gassosi. Costante di equilibrio in funzione delle attività per equilibri eterogenei.<br>**Lezione 9 – Diagrammi di stato.**<br>Stati di aggregazione della materia e trasformazioni di fase. Lo stato solido: solidi amorfi e cristallini. I reticoli di Bravais: sistemi cristallini e celle elementari. Classificazione dei Cristalli. Metalli e solidi ionici: cristalli a massimo impaccamento. Stato liquido e stato gassoso. Analisi termica e termogramma. Diagramma di stato p-T e p-V di sostanze pure: diagramma di stato dell'Acqua e del Ferro. Sistemi eterogenei e fasi. Condizione di equilibrio di un sistema eterogeneo bifasico ad un componente: equazione di Clapeyron. Equilibrio fase gassosa/fase condensata: equazione di Clausius-Clapeyron. Tensione di Vapore: evaporazione ed ebollizione. Condizione di equilibrio in un sistema eterogeneo a più componenti.<br>**Lezione 10 – Le Soluzioni.**<br>Differenti tipi di soluzioni. Soluzioni in fase liquida: solvente e soluto, composizione della soluzione. Passaggio in soluzione e entalpia di mescolamento. Saturazione e solubilità. Soluzioni ideali: $\Delta G_{mix}$ miscela di due gas ideali. Tensione di vapore di un componente liquido puro. Soluzioni binarie liquido-liquido ideali: legge di Raoult. $\Delta G_{mix}$ di soluzioni liquido-liquido ideali. Soluzioni solido-liquido ideali: proprietà colligative. Abbassamento tensione di vapore del solvente, innalzamento ebullioscopico, abbassamento crioscopico, pressione osmotica. Coefficiente di van't Hoff.<br>**Lezione 11 – Cinetica Chimica: introduzione**<br>Reazioni chimiche e conservazione della massa. Meccanismo di reazione e reazioni elementari. Meccanismo di reazione e stechiometria. Analisi formale ed analisi empirica. Velocità di reazione: definizione teorica e operativa. Equazione cinetica. Ordine di reazione e molecolarità. Legge di azione di Massa. Reazione elementari reversibili e costante di equilibrio. Legge di Arrhenius ed energia di attivazione.<br>**Lezione 12 – Cinetica Chimica: analisi formale**<br>Meccanismo cinetico ed sistema di equazioni differenziali. Uso delle equazioni di conservazione di massa. Sistema di equazioni differenziale ordinarie del I ordine algebrici a coefficienti costanti. Sistemi autonomi. Spazio delle fasi. Soluzione dei sistemi ODE.<br>**Lezione 13 – Cinetica Chimica: integrazione diretta**<br>Soluzione analitica di sistemi ODE per meccanismi semplici del prim'ordine: $A \rightarrow P$, $A \Leftrightarrow P$, $A \rightarrow B \rightarrow C$; del second'ordine: $2A \rightarrow P$, $A+B \rightarrow P$. |

| | |
|---|---|
| | **Lezione 14 – Cinetica Chimica: analisi empirica e catalisi**<br>Metodi per determinare l'ordine di reazione per velocità di reazione che dipendono da un'unica specie: integrazione diretta, differenziale, tempi di dimezzamento. Metodi per determinare l'ordine di reazione per velocità di reazione che dipendono da più specie: condizioni iniziali stechiometriche, isolamento, velocità iniziali. Principi di Catalisi chimica. Catalisi ed equilibrio chimico. Energia di attivazione di reazioni catalizzate. Catalisi enzimatica: meccanismo di Brown. Equazioni di Henri-Michaelis-Menten (ipotesi pseudo equilibrio) e Equazione di Briggs-Haldane (ipotesi stato stazionario).<br>**Lezione 15 – Esperienze di Laboratorio**<br>• Determinazione del entalpia di evaporazione dell'acqua.<br>• Determinazione del calore di combustione del saccarosio.<br>• Determinazione dell'abbassamento crioscopico di soluzioni di soluti non volatili.<br>Esempio di stesura della relazione finale<br>**Laboratorio**<br>• Determinazione del entalpia di evaporazione dell'acqua.<br>• Determinazione del calore di combustione del saccarosio.<br>• Determinazione dell'abbassamento crioscopico di soluzioni di soluti non volatili.<br>• Esercitazione Matlab per il trattamento dei dati di laboratorio |
| Testi di riferimento | Dispense del corso formato pdf scaricabili dal sito del corso:<br>http://puccini.chimica.uniba.it/~mavelli/Didattica/ChimicaFisica/index.html<br>esercizi svolti, programmi Matlab per il trattamento dati e testi e soluzioni delle prove in Itinere<br>Testi Consigliati<br>• Atkins Chimica Fisica – Zanichelli<br>• Taylor J.R., Introduzione all'analisi degli Errori, Zanichelli |
| Note ai testi di riferimento | |
| Metodi didattici | Lezioni frontali con slides, lavori di gruppo pre-, during e post-laboratorio, esercitazioni numeriche e di peer-review |
| Metodi di valutazione | La modalità di valutazione è attraverso esame orale finale con discussione delle relazioni di laboratorio.<br>L'esame orale si articola nella discussione di un argomento a scelta dello studente + 4 argomenti a scelta del docente. Perché l'esame possa essere considerato superato lo studente deve aver esposto in maniera soddisfacente tutti e cinque gli argomenti oggetto di esame. In caso di discussione non sufficiente di uno o più argomenti il docente può, a suo insindacabile giudizio, procedere alla selezione di ulteriori argomenti per verificare la preparazione dello studente.<br>Le tre relazioni di laboratorio devono essere presentate in formato cartaceo e discusse in sede di esame. Possono altresì essere consegnante almeno 15 giorni prima della data dell'appello e discusse/correte con il docente. In tal caso la versione corretta delle relazioni dovrà essere presentata in sede di esame e la discussione delle relazioni verrà considerata superata.<br>Durante lo svolgimento del corso verranno svolte 2 prove in Itinere.<br>• II prova in itinere: Lezioni I-V<br>• III prova in itinere: Lezioni VI-X<br>Per ogni prova in itinere superata con punteggio superiore a 18, verrà considerata superata una delle quattro domande a disposizione del |

| | |
|---|---|
| | docente con un punteggio pari a quello conseguito nella prova in itinere. Lo studente potrà comunque non avvalersi del risultato di una o più prove in Itinere rispondere ad una domanda sulla parte di programma corrispondente. Il voto finale sarà dato dalla media del voto di esame con i voti delle prove in itinere superate. |
| Criteri di valutazione (per ogni risultato di apprendimento atteso su indicato, descrivere cosa ci si aspetta lo studente conosca o sia in grado di fare e a quale livello al fine di dimostrare che un risultato di apprendimento è stato raggiunto e a quale livello) | Lo studente deve dimostrare di aver recepito i concetti fondamentali e le leggi della termodinamica chimica e padroneggiare gli strumenti matematici che sono alla base di essa.<br>Conoscere la differenza fra proprietà chimico-fisiche intensive ed estensive, e le proprietà delle grandezze parziali molari.<br>Conoscere le quattro leggi della termodinamica, l'equazione fondamentale della termodinamica, la definizione delle principali funzioni di stato: Energia interna (E), Entalpia (H), Energia Libera di Gibbs (G) e di Helmotz (F) e la forma dei loro differenziali per sistemi a composizione variabile e costante. Padroneggiare il concetto di potenziale chimico.<br>Padroneggiare i principi di spontaneità ed equilibrio in differenti condizioni operative.<br>Essere in grado, dai dati tabulati, di calcolare i valori delle Entalpie ed Energia libere di reazione in condizioni standard a differente temperatura e della costante di equilibrio per reazioni chimiche a stechiometria nota.<br>Conoscere le differenze principali fra i tre stati fondamentali della materia: solido, liquido, aeriforme. Conoscere la differenza fra gas e vapore, fra un gas a comportamento ideale e reale.<br>Saper discutere i diagrammi di stato di sostanze pure e le leggi di equilibrio di fase. Conoscere la condizione di equilibrio per sistemi a multi-componenti.<br>Ricavare le equazioni fondamentali che descrivono le proprietà colligative ed il mescolamento.<br>Saper impostare e risolvere sistemi di equazioni differenziali per meccanismi cinetici semplificati. Conoscere le equazioni di Michaelis-Menten e Haldane-Briggs per la cinetica enzimatica<br>Essere in grado di scrivere una relazione di laboratorio in maniera critica riportando correttamente i dati misurati e valutando gli errori su proprietà stimate con procedure di misure indirette. |
| Altro | |
| | |