

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	Maurizio Dabbicco	maurizio.dabbicco@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) Laboratorio (30h)

Organizzazione della didattica	Ore totali	Ore di corso	Ore di studio individuale
	150	62	88

Calendario	Inizio attività didattiche	Fine attività didattiche
	06.03.2017	16.06.2017

Syllabus	
Prerequisiti	Fondamenti di Analisi Matematica e Cenni Calcolo differenziale. Rudimenti di programmazione e calcolo in Matlab
Risultati di apprendimento previsti (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)	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione</i> conoscenza degli aspetti di base delle chimica fisica applicata ai materiali. • <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate</i> capacità di calcolare autonomamente dai dati tabulati proprietà termodinamiche di interesse in condizioni standard a non standard, capacità di derivare matematicamente proprietà termodinamiche dalle legge fondamentali • <i>Autonomia di giudizio</i> capacità di valutazione degli errori commessi nelle procedure di misura di proprietà chimica fisiche. • <i>Abilità comunicative</i> Capacità di scrivere una breve relazione di laboratorio nel formato di un articolo scientifico • <i>Capacità di apprendere</i> 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 I- Principi di Termodinamica Classica. 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.

Gas Reali: deviazioni dal comportamento ideale. Equazione di van der Waals. Diagramma di Andrews e parametri critici.

Lezione 2 – Il Primo principio .

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.

Entalpia funzione di stato. Differenziale dell'entalpia. Calore scambiato a volume e pressione costante. Relazione fra C_p e C_v . Relazione di Mayer.

Lezione 3 – Coefficiente di Joule-Thomson e Volumi parziali molari.

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.

Lezione 4 – Termochimica.

Calore di reazione ed equazione termochimica. Entalpia di reazione ΔH_R ed Energia di reazione ΔE_R . Calorimetria. Relazione fra ΔH_R e ΔE_R . Reazioni chimiche: equazione stechiometrica e grado di avanzamento. Calcolo del ΔH_R a partire dalle entalpie parziali molari e dal grado di avanzamento. Stato standard. Entalpie standard di formazione ΔH_f^\ominus tabulate. Legge di Hess. Calcolo dell'entalpia di reazione standard a partire dalle ΔH_f^\ominus tabulate. Legge di Kirchhoff. Calcolo dell'entalpia di reazione standard ad una temperatura differente da quella dei dati tabulati.

Lezione 5 – Il Secondo Principio.

$dS=Q_{rev}/T$ differenziale esatto. Entropia come funzione di stato. Processi Spontanei e variazione di entropia: flusso di calore reversibile ed irreversibile. Il principio: ΔS_{Univ} criterio di spontaneità, disuguaglianza di Clausius. Macchine termiche ed enunciato di Kelvin-Planck. Il Terzo Principio della termodinamica. Calcolo delle entropie standard S delle sostanze pure in condizioni standard. Entalpia di reazione ΔS_R . Variazione di ΔS_R con la temperatura.

Lezione 6 – Energia Libera.

Energie libere di Helmholtz e Gibbs: principi di spontaneità ed equilibrio. Contributo entalpico ed entropico al ΔG_R per le reazioni spontanee: temperatura di inversione.

ΔG_f^\ominus di formazione standard e calcolo dei ΔG_R^\ominus di reazione standard. ΔG_R in condizioni non standard. Variazione di G del sistema durante una reazione chimica. Lavoro massimo e lavoro utile.

Lezione 7 – Trasformazioni di Legendre e costante di equilibrio.

Equazione fondamentale della termodinamica. Trasformazioni di Legendre e differenziali delle funzioni termodinamiche per sistemi a composizione costante: variabili naturali. Equazioni di Maxwell.

Variazione di G con la pressione: gas ideale e specie in fase condensata.

Variazione di G con la temperatura. Variazione del ΔG_R di reazione con la temperatura: equazione di Gibbs-Helmholtz. Stima del ΔG_R ad una temperatura differente da quella del ΔG_R tabulato. ΔG_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.

Lezione 8 – Potenziale Chimico.

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.

Lezione 9 – Diagrammi di stato.

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.

Lezione 10 – Le Soluzioni.

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: ΔG_{mix} miscela di due gas ideali. Tensione di vapore di un componente liquido puro. Soluzioni binarie liquido-liquido ideali: legge di Raoult. ΔG_{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.

Lezione 11 – Cinetica Chimica: introduzione

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.

Lezione 12 – Cinetica Chimica: analisi formale

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.

Lezione 13 – Cinetica Chimica: integrazione diretta

Soluzione analitica di sistemi ODE per meccanismi semplici del prim'ordine: $A \rightarrow P$, $A \rightleftharpoons P$, $A \rightarrow B \rightarrow C$; del second'ordine: $2A \rightarrow P$, $A+B \rightarrow P$.

	<p>Lezione I4 – Cinetica Chimica: analisi empirica e catalisi 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).</p> <p>Lezione L01 – Esperienze di Laboratorio</p> <ul style="list-style-type: none"> • Determinazione del entalpia di evaporazione dell'acqua. • Determinazione del calore di combustione del saccarosio. • Determinazione dell'abbassamento crioscopico di soluzioni di soluti non volatili. <p>Esempio di stesura della relazione finale</p> <p>Lezione L02 – Teoria della misura Metodi di misura diretti, indiretto e strumentale. Misura ed incertezza. Cifre significative. Errori illegittimi, random e sistematici. Precisione ed accuratezza di una misura. Esattezza, e Precisione di un metodo di misura. Errore relativo percentuale e cifre significative.</p> <p>Lezione L03 – Stima dell'errore Stima dell'errore nei metodi di misura. Stima della misura e dell'errore in misure ripetute. Misure indirette e propagazione dell'errore: caso della somma, differenza, prodotto e quoziente di misure dirette. Legge generale di propagazione dell'errore. Formula generale della propagazione dell'errore.</p> <p>Lezione L04 – Analisi statistica dei dati Analisi statistica nel caso di misure ripetute. Valori discreti e Probabilità, valori continui e densità di probabilità. Divisione in classi e Istogramma. Frequenze e probabilità. Medie e varianze aritmetiche e medie e varianze delle densità di probabilità. Funzione Gaussiana. Teorema di Laplace.</p> <p>Lezione L05 – Interpolazione curve Interpolazione dei dati. Funzione verosimiglianza e stima dei parametri. Errore sulla stima dei parametri. Interpolazione lineare: stima di intercetta e coefficiente angolare, stima degli errori. Stima errore sulla variabile dipendente y. Stima dei parametri della retta nel caso di errori differenti sulle yi.</p> <p>Laboratorio</p> <ul style="list-style-type: none"> • Determinazione del entalpia di evaporazione dell'acqua. • Determinazione del calore di combustione del saccarosio. • Determinazione dell'abbassamento crioscopico di soluzioni di soluti non volatili. • Esercitazione Matlab per il trattamento dei dati di laboratorio
Testi di riferimento	Dispense del corso formato pdf scaricabili dal sito del corso: http://puccini.chimica.uniba.it/~mavelli/Didattica/ChimicaFisica/index.html esercizi svolti, programmi Matlab per il trattamento dati e testi e soluzioni delle prove in Itinere Testi Consigliati <ul style="list-style-type: none"> • Atkins Chimica Fisica – Zanichelli • 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	<p>La modalità di valutazione è attraverso esame orale finale con discussione delle relazioni di laboratorio.</p> <p>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.</p> <p>Le tre relazioni di laboratorio devono essere presentate in formato cartaceo e discusse in sede di esame. Possono altresì essere consegnate almeno 15 giorni prima della data dell'appello e discusse/corrette 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.</p> <p>Durante lo svolgimento del corso verranno svolte 3 prove in itinere.</p> <ul style="list-style-type: none"> • I prova in itinere: Lezioni L02-L05 • II prova in itinere: Lezioni I-V • III prova in itinere: Lezioni VI-X <p>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.</p>
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)	<p>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.</p> <p>Conoscere la differenza fra proprietà chimico-fisiche intensive ed estensive, e le proprietà delle grandezze parziali molari.</p> <p>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 Helmholtz (F) e la forma dei loro differenziali per sistemi a composizione variabile e costante. Padroneggiare il concetto di potenziale chimico.</p> <p>Padroneggiare i principi di spontaneità ed equilibrio in differenti condizioni operative.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>Ricavare le equazioni fondamentali che descrivono le proprietà</p>

	<p>colligative ed il mescolamento.</p> <p>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</p> <p>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.</p>
Altro	