

SCUOLA	delle Scienze di Base e Applicate
ANNO ACCADEMICO	2014/2015
CORSO DI LAUREA MAGISTRALE A CICLO UNICO	Chimica e Tecnologia Farmaceutiche -2013 (cod. 2013)
INSEGNAMENTO	Chimica Fisica
TIPO DI ATTIVITÀ	Base
AMBITO DISCIPLINARE	Discipline chimiche
CODICE INSEGNAMENTO	01874
ARTICOLAZIONE IN MODULI	No
NUMERO MODULI	
SETTORI SCIENTIFICO DISCIPLINARI	CHIM/02
DOCENTE RESPONSABILE	Eugenio CAPONETTI Professore Ordinario Università di Palermo
CFU	8
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLO STUDIO PERSONALE	140
NUMERO DI ORE RISERVATE ALLE ATTIVITÀ DIDATTICHE ASSISTITE	60
PROPEDEUTICITÀ	Chimica Generale ed Inorganica Matematica e Fisica
ANNO DI CORSO	II
SEDE DI SVOLGIMENTO DELLE LEZIONI	Dipartimento di STEBICEF
ORGANIZZAZIONE DELLA DIDATTICA	Lezioni frontali, esercitazioni in aula
MODALITÀ DI FREQUENZA	Facoltativa
METODI DI VALUTAZIONE	Prova orale eventualmente preceduta da test scritto
TIPO DI VALUTAZIONE	Voto in trentesimi
PERIODO DELLE LEZIONI	Secondo semestre
CALENDARIO DELLE ATTIVITÀ DIDATTICHE	http://offweb.unipa.it/
ORARIO DI RICEVIMENTO DEGLI STUDENTI	Da definire

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Conoscenza e capacità di comprensione

Acquisizione critica delle basi fondamentali della chimica fisica (termodinamica classica, cinetica, struttura della materia). Capacità di utilizzare il linguaggio e la terminologia specifici della disciplina.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Capacità di scegliere ed applicare gli strumenti matematici per esporre i principi base e per risolvere problemi di termodinamica o cinetica chimica aventi per oggetto semplici trasformazioni fisiche e/o chimiche.

Autonomia di giudizio

Essere in grado di estrarre e valutare le informazioni ottenute dai risultati sperimentali, e valutare l'attendibilità dei dati.

Abilità comunicative

Saper esporre in termini chiari e rigorosi, con l'ausilio di funzioni e/o diagrammi, gli argomenti acquisiti.

Capacità d'apprendimento

Lo studente al termine del corso dovrebbe possedere gli strumenti per affrontare e comprendere argomenti avanzati di chimica fisica di notevole interesse farmaceutico, quali ad esempio i fenomeni di superficie e

interfase, la termodinamica dei colloidi, i fenomeni di trasporto e di diffusione, gli equilibri di ripartizione e di adsorbimento, e la termodinamica del non equilibrio.

OBIETTIVI FORMATIVI DEL CORSO

Sono fornite allo studente le conoscenze scientifiche e metodologiche di base necessarie alla comprensione e all'approfondimento degli aspetti chimico-fisici alla base di metodi e processi biologici, farmaceutici, farmacologici e tecnologici.

CORSO	CHIMICA FISICA
ORE FRONTALI	LEZIONI FRONTALI
5	<p>INTRODUZIONE. Obiettivi ed organizzazione del corso. Richiami di matematica e fisica. Grandezze fisiche e unita di misura. Il Sistema Internazionale. Principali raccomandazioni IUPAC riguardanti la chimica fisica.</p> <p>Mondo microscopico e mondo macroscopico. Termodinamica classica e statistica. Sistema termodinamico e stato del sistema. Sistemi isolati, chiusi, aperti. Variabili e funzioni di stato: p, T, V, composizione. Variabili estensive ed intensive. Trasformazioni fisiche e reazioni chimiche.</p> <p>Proprietà dei gas. Gas ideali. Equazioni di stato del gas ideale. Scala assoluta della temperatura. Miscele di gas ideali: pressioni parziali, volumi parziali. Deviazioni dall'idealità. Fattore di compressibilità. L'equazione di van der Waals. Cenni sulle altre equazioni di stato dei gas reali. I fenomeni critici ed il principio degli stati corrispondenti.</p>
5	<p>PRIMO PRINCIPIO E TERMOCHIMICA. Trasformazioni termodinamiche. Il lavoro. Il calore. Funzioni d'iter. Convenzione dei segni. Energia interna ed entalpia. Trasformazioni reversibili ed irreversibili. Stati di equilibrio. Trasformazioni isoterme, isobare, isocore e adiabatiche. Capacità termica. C_v e C_p. Interpretazione molecolare delle capacità termiche (principio di equipartizione dell'energia interna).</p> <p>Il calore nelle reazioni chimiche. Misure calorimetriche. H_f°. Legge di Hess. Entalpia di reazione e dipendenza dalla temperatura (legge di Kirchhoff). ΔH nelle trasformazioni fisiche. Effetto Joule e Joule-Thomson.</p>
5	<p>SECONDO, TERZO PRINCIPIO ED EQUILIBRIO. Trasformazioni spontanee. Richiami sui cicli termodinamici. Definizione termodinamica dell'entropia. Cenni sulla interpretazione statistica dell'entropia. ΔS nelle trasformazioni termodinamiche. ΔS nelle transizioni di stato. Il teorema di Nernst. Calcolo di S di una sostanza in base al terzo principio. Trasformazioni spontanee e reversibili e criteri di spontaneità. Le funzioni energia libera (A e G) e loro significato.</p> <p>Equazione fondamentale della termodinamica e sua derivazione. Dipendenza di G da T e p. Equazione di Gibbs-Duhem. Equazione di Gibbs-Helmholtz. Potenziale chimico. μ dei gas ideali e dei gas reali (fugacità).</p>
2.5	<p>TRASFORMAZIONI FISICHE DI SOSTANZE PURE. Stabilità delle fasi. Equilibri di fase e diagrammi di stato. Tensione di vapore. La curva limite solido-liquido. La curva limite liquido-vapore. La curva limite solido-vapore (equazioni di Clapeyron e di Clausius-Clapeyron). Esempi di diagrammi di stato e loro uso.</p>
7.5	<p>TRASFORMAZIONI FISICHE DI MISCELE SEMPLICI. Soluzioni. Soluzioni ideali. Legge di Raoult. Legge di Henry, Grandezze parziali molari. ΔG, ΔS, ΔH, ΔV, ΔU di mescolamento. Le proprietà colligative. Miscele di liquidi volatili: equilibrio liquido-vapore, diagramma di stato isoterma e isobaro. Regola delle fasi e sua derivazione. Rappresentazione grafica della distillazione. Regola della leva. Le soluzioni reali e il concetto di attività, attività del solvente e attività del soluto. Sistemi a due componenti Diagrammi di stato liquido-vapore con e senza azeotropo. Liquidi parzialmente miscibili. Analisi termica. Diagrammi di stato liquido-solido con e senza eutettico. Sistemi a tre componenti: diagrammi di stato triangolari.</p>
2.5	<p>REAZIONI ED EQUILIBRI CHIMICI. La condizione di equilibrio. ΔG di reazione. Reazioni esoergoniche ed endoergoniche. Composti stabili e composti instabili.</p>

	Reazioni in fase gassosa e in fase condensata. ΔG° , quoziente di reazione e costante di equilibrio termodinamica. Alcune considerazioni sugli stati standard. La risposta degli equilibri alla presenza di un catalizzatore. La risposta degli equilibri al mutamento della pressione. La risposta degli equilibri al mutamento della temperatura (equazione di van't Hoff).
2.5	ELETTROCHIMICA. Soluzioni di elettroliti. Potenziale chimico di soluti ionici, coefficiente di attività medio. Teoria di Debye-Huckel. Pile reversibili. Rappresentazione convenzionale di una pila. Differenza di potenziale; elettrodo di riferimento, potenziale standard. Scala elettrochimica. Lavoro elettrico e ΔG . Equazione di Nernst. Celle a concentrazione. Vari tipi di elettrodo. Potenziale di membrana.
10	CINETICA CHIMICA. Cinetica chimica empirica. Velocità delle reazioni. Equazioni cinetiche e costanti cinetiche. Ordine di reazione. Metodi per la determinazione dell'equazione cinetica (velocità iniziali, isolamento). Le reazioni del primo ordine. Le reazioni del secondo ordine. t_{50} e t_{90} . Pseudo-ordine. L'interpretazione delle leggi cinetiche: reazioni elementari. Reazioni consecutive. Reazioni parallele. Meccanismi di reazione. Molecolarità. Approssimazione dello stato stazionario. Ipotesi del preequilibrio. Dipendenza della velocità di reazione dalla forza ionica e dalla temperatura. Equazione di Arrhenius. Catalisi. Cenni sulla teoria delle collisioni e sulla teoria dello stato di transizione. Cinetica enzimatica. Modello di Michaelis-Menten.
10	STRUTTURA DELLA MATERIA. Dualismo onda-particella. Radiazione del corpo nero. Effetto fotoelettrico. Spettri atomici a righe. Atomo di Bohr e suoi limiti. Postulato di De Broglie. Il principio di indeterminazione di Heisenberg. I postulati della meccanica quantistica. L'equazione di Schroedinger. La funzione d'onda. La struttura dell'atomo di idrogeno e gli orbitali. L'approssimazione adiabatica. Le proprietà statistiche dell'elettrone. Lo spin. Ψ polielettronica. L'approssimazione a orbitali molecolari. Il metodo di Hartree-Fock e i suoi limiti. I metodi semiempirici e post-HF. I metodi DFT. Il legame a idrogeno. Iperconiugazione. Cenni di chimica quantistica computazionale e sue applicazioni.
	ESERCITAZIONI
10	Esercitazioni numeriche in aula effettuate per l'acquisizione di strategie e tattiche per la risoluzione dei problemi di chimica fisica.
TESTI CONSIGLIATI	Peter W. Atkins, Julio De Palma, <i>Chimica Fisica</i> (5a Ed. It.), Zanichelli, 2012 Peter W. Atkins, Julio De Palma, <i>Elementi di Chimica Fisica</i> (3a Ed. It.), Zanichelli, 2007. G. K. Vemulapalli, <i>Chimica Fisica</i> , EdiSES, 1995 Arthur W. Adamson, <i>Trattato di Chimica Fisica</i> , Piccin, 1976 (per consultazione). Appunti di lezione.