

# Testi del Syllabus

Resp. Did. **BERBENNI VITTORIO** **Matricola: 001153**

Docente **BERBENNI VITTORIO, 9 CFU**

Anno offerta: **2016/2017**

Insegnamento: **502121 - CHIMICA FISICA E LABORATORIO - MOD. 1**

Corso di studio: **08401 - CHIMICA**

Anno regolamento: **2015**

CFU: **9**

Settore: **CHIM/02**

Tipo Attività: **B - Caratterizzante**

Anno corso: **2**

Periodo: **Primo Semestre**



## Testi in italiano

### Lingua insegnamento

ITALIANO

### Prerequisiti

Concetti base acquisiti nei corsi di Chimica generale ed Inorganica, Matematica e Fisica.

### Obiettivi formativi e risultati di apprendimento

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. L'equilibrio chimico e l'equilibrio di fase. Le proprietà termodinamiche di miscela. calcolo della attività e dei coefficienti di attività. 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 La crisi della fisica classica e la introduzione della meccanica quantistica. La equazione di Schroedinger e l'interpretazione di Born della funzione d'onda. La teoria quantistica:

tecniche ed applicazioni: il moto di una particella in una scatola, il moto vibrazionale, il rotore rigido. Struttura e spettri dell'atomo idrogenoide.

<b>Metodi didattici</b>	Tutti gli argomenti verranno affrontati con lezioni frontali affiancate da un congruo numero di esercizi numerici
<b>Testi di riferimento</b>	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 di verifica dell'apprendimento</b>	Prova scritta e prova orale
<b>Altre informazioni</b>	Niente di particolare



## Testi in inglese

<b>Lingua insegnamento</b>	ITALIAN
<b>Prerequisiti</b>	Basic knowledges from the courses of General and Inorganic chemistry, Mathematics and Physics
<b>Obiettivi formativi e risultati di apprendimento</b>	The three principles of thermodynamics. The main thermodynamic functions: internal energy, enthalpy, entropy, free energy of Gibbs and Helmholtz. The chemical and the phase equilibrium. The thermodynamic properties of mixtures. The quantum mechanics: the Schroedinger equation. The operators. The solutions of the Schroedinger equation for the hydrogen atom.
<b>Programma e contenuti</b>	The first principle of thermodynamics: heat and work. The thermodynamic properties internal energy (U) and enthalpy (H). The relationship between U and H. Thermochemistry: the formation enthalpy. What is it, how can it be determined, what is its use. The integral enthalpy of dissolution: the formation enthalpy of ions. The thermodynamic cycle of Born-Haber. Enthalpy of chemical reaction and its dependence on the temperature. Relationship between the enthalpy of formation and the bond energy: some examples. Calorimetry: classification of calorimeters based on operation mode and on working principle. The second principle of thermodynamics: the function entropy and its thermodynamic and statistic definition. Entropy and spontaneous processes. Entropy changes with pressure and temperature. The transition entropy. The third principle of thermodynamics: the calculation of the absolute entropy of a substance as a function of temperature. The functions G and A: physical meaning. The differential of the functions U, H, S, G, A. The Maxwell's relationships. The relationships between Cp and Cv. Phase equilibrium: the Gibbs Theorem. Phase equilibrium in one-component system. The phase rule. Phase equilibrium in two-component systems: the liquid-vapor and the solid-liquid equilibria. Phase diagrams. The thermodynamic properties of mixtures: the partial molar volume and the chemical potential. Ideal and real mixtures: the activity and the activity coefficient. The chemical equilibrium: the equilibrium constant and its dependence on pressure and temperature. Calculation of the equilibrium constant. The unanswered questions of classical physics and the quantum mechanics. The Schroedinger equation. The Wave function and the Born interpretation of the wave function. The operators and the Heisenberg principle. Applications : the particle in a box, the harmonic oscillator, the rigid rotor and the particle on a spherical surface. Structure and spectra of the hydrogen atoms. The quantic numbers.

<b>Metodi didattici</b>	All the topics will be considered both from the teoretical point of view and with the discussion of several problems and exercises.
<b>Testi di riferimento</b>	Peter Atkins- Julio de Paula "Chimica Fisica" (V italian edition translated from the IX english edition) Zanichelli. Some written material and excercises with solutions provided by the teacher per e-mail.
<b>Modalità di verifica dell'apprendimento</b>	Written and Oral Exams
<b>Altre informazioni</b>	Nothing special