

COURSE SYLLABUS

Physical Chemistry

2122-2-E2701Q013

Obiettivi

Apprendimento dei concetti di base della termodinamica classica di equilibrio e della cinetica chimica elementare e sviluppo della capacità di analisi di semplici sistemi di rilievo in scienza dei materiali.

Conoscenze e capacità di comprensione acquisite

- Metodologie di analisi di sistemi termodinamici isolati e chiusi anche reattivi
- Procedure per la determinazione delle principali grandezze termodinamiche
- Tecniche per la valutazione dei processi termodinamicamente ammissibili tra stati di equilibrio
- Metodologie idonee alla descrizione sistemi chimico-fisici di rilievo in scienza dei materiali

Conoscenze e capacità di comprensione applicative acquisite

- Determinazione delle equazioni di stato e dei potenziali termodinamici di sistemi di interesse per la scienza dei materiali
 - Valutazione del limite di applicabilità di modelli termodinamici elementari in sistemi di interesse per la scienza dei materiali
-

- Valutazione dell'appropriatezza dei modelli termodinamici nell'analisi di sistemi reali
- Capacità di modellazione di sistemi fisici reali in termini termodinamici

Abilità comunicative

Uso rigoroso del linguaggio naturale in ambito scientifico

Capacità di apprendere

Attivazione di competenze critiche nell'analisi di modelli scientifici

Contenuti sintetici

Richiami di matematica

Principio zeresimo, primo e secondo principio della termodinamica

Funzioni di stato ausiliarie

Termodinamica dei gas ed equilibri di reazione in fase gassosa

Stati di aggregazione e fasi

Cinetica chimica

Programma esteso

- **RICHIAMI DI MATEMATICA:** Differenziale esatto, derivate parziali, forme differenziali. Notazione.
- **PRINCIPIO ZERESIMO, PRIMO E SECONDO PRINCIPIO DELLA TERMODINAMICA:** Sistemi e variabili termodinamiche. La temperatura e il principio zeresimo. Il lavoro. Energia interna e primo principio. Concetto di funzione di stato. Processi adiabaticamente impossibili, naturali e reversibili. Entropia e secondo principio. Prima formulazione di un criterio di equilibrio.
- **FUNZIONI DI STATO AUSILIARIE:** Entalpia, energie libere di Helmholtz e di Gibbs. Proprietà e utilità delle funzioni di stato ausiliarie. Equazioni fondamentali per un sistema chiuso. Il potenziale chimico. Criterio di equilibrio. Grandezze termodinamiche ausiliarie. Determinazione delle variazioni delle funzioni termodinamiche al variare della pressione e della temperatura. Grandezze molari e grandezze molari parziali.
- **TERMODINAMICA DEI GAS ED EQUILIBRI DI REAZIONE IN FASE GASSOSA:** Gas perfetto: forma del potenziale chimico ed equazione di stato. Gas reali: concetto di fugacità. Esempi numerici di determinazione delle variazioni delle funzioni termodinamiche al variare di pressione, volume e temperatura. Miscele perfette di gas. Costante di equilibrio per reazioni in fase gassosa e sua dipendenza da temperatura e pressione. Grado di avanzamento di una reazione chimica.
- **STATI DI AGGREGAZIONE E FASI:** La regola delle fasi per componenti che non reagiscono o che reagiscono. Equazione di Clausius-Clapeyron. Calore latente. Cenni ai diagrammi di stato ed equilibri di fase per sistemi ad un solo componente. Polimorfismo. Transizioni di fase.
- **CINETICA CHIMICA:** Velocità di reazione. Ordine e molecolarità delle reazioni. Le equazioni cinetiche. Effetto della temperatura sulla costante di velocità. Integrazione delle equazioni cinetiche: Integrazione

dell'equazione di ordine zero, del primo ordine e del secondo ordine. Cinetica e equilibrio chimico: velocità dirette e inverse, teoria dello stato di transizione. Reazioni consecutive. Approssimazione dello stadio determinante della velocità globale. Approssimazione dello stato stazionario. Reazioni parallele.

Prerequisiti

Analisi matematica di funzioni a più variabili

Modalità didattica

Lezioni frontali ed esercitazioni numeriche. Gli studenti potranno fruire di strumenti di esercitazione assistita e di autovalutazione disponibili sul sito di elearning.

Le lezioni saranno tenute in lingua italiana.

Materiale didattico

- K. Denbigh, I principi dell'equilibrio chimico, Casa Editrice Ambrosiana.
- Dispense del docente

Gli studenti potranno fruire di strumenti di esercitazione assistita, di autovalutazione e di materiale didattico integrativo disponibili sul sito di elearning.

Periodo di erogazione dell'insegnamento

Primo semestre del 2° anno

Modalità di verifica del profitto e valutazione

L'esame di Chimica Fisica si articola in una prova scritta e un colloquio.

La prova scritta consiste nello svolgimento di tre esercizi numerici. Tipicamente il primo esercizio verte sugli aspetti fondamentali della termodinamica classica (1° e 2° principio, calcolo di lavori e calori scambiati, ecc.); il secondo è focalizzato sugli equilibri fisici (transizioni di fase, calori latenti di transizione, punti di fusione e di ebollizione, ecc.); e il terzo richiede lo studio di un equilibrio chimico (calcolo della costante di equilibrio, energie libere di reazione, ecc.) e/o di una cinetica di reazione /determinazione dell'ordine di reazione, energie di attivazione, ecc.).

Per ogni esercizio risolto in maniera corretta e completa vengono assegnati 10 punti. L'ammissione all'orale richiede un punteggio complessivo nella prova scritta non inferiore a 15 punti.

La prova orale verte sulla eventuale risoluzione degli esercizi non correttamente risolti dallo studente e sulla teoria.

La prova orale deve essere sostenuta nella stessa sessione d'esame in cui è stata sostenuta la prova scritta.

Orario di ricevimento

Su appuntamento
