

**PROGRAMMA Corso di Chimica**  
**Ing. Energetica AA 2019-2020**  
**docente prof. Isabella Chiarotto**  
**tutor dr. Davide Corinti**

Particelle fondamentali di un atomo. Numero atomico e numero di massa. Nuclidi isotopi ed elementi chimici. Massa atomica relativa di un nuclide e di un elemento. Sostanze, formule molecolari ed unità di formula. Rappresentazione quantitativa di una reazione chimica equazione stechiometrica. Masse molecolari relative. Composizione elementare di un composto e sua formula minima. Mole e Numero di Avogadro. Massa molare di una sostanza.

**Struttura dell'atomo.** Teoria atomica della materia. Modello quantistico di Bohr dell'atomo di idrogeno. Principio di indeterminazione di Heisenberg. Modello quantistico ondulatorio degli atomi, orbitali e loro forma.

Struttura elettronica di atomi polielettronici. Numeri quantici. Principio di esclusione Pauli e della massima molteplicità (o di Hund) -Aufbau- **Sistema periodico.** Carica nucleare effettiva, energia di ionizzazione, affinità per l'elettrone, raggio atomico, raggio ionico e loro periodicità. **Legame ionico:** energia reticolare, ciclo di Born-Haber. Cenni sui reticoli cristallini e cristalli ionici.

**Legame Covalente** Teoria degli orbitali di valenza (VB). Ibridizzazione degli orbitali e geometria delle molecole, modello VSEPR. Rappresentazione di strutture geometriche relative a ibridizzazioni:  $sp, sp^2, sp^3, sp^3d, sp^3d^2$ . Esercitazioni su molecole:  $CH_4, CO_2, SO_2, SO_3, PCl_3, PCl_5, I_3^-, XeF_4$

Esercitazioni: Stechiometria di reazione Reagenti in proporzioni stechiometriche in difetto e in eccesso. Resa di una reazione.

**Legame Covalente** Teoria dell'orbitale molecolare (MO); orbitali molecolari leganti e antileganti. Ordine di legame. Orbitali molecolari per molecole biatomiche di Li, Be, B, C, N, O, F, proprietà paramagnetiche e diamagnetiche delle molecole. Orbitali molecolari e ordine di legame per la molecola di NO. **Legame metallico:** banda di conduzione e banda di valenza, gap energetico e distinzione tra conduttori, semiconduttori e isolanti. Drogaggio dei semiconduttori p e n. **Legame covalente puro e polare.** Molecole polari e momento dipolare. Definizione di momento dipolare e calcolo della percentuale di carattere ionico. **Elettronegatività:** scala secondo Pauling e Mulliken. **Forze intermolecolari:** forze di van der Waals, forze di London, dipolo permanente e dipolo indotto. Legame idrogeno. Influenza delle forze intermolecolari sullo stato fisico delle molecole, temperature di ebollizione e di fusione di alcuni composti in relazione alla grandezza degli atomi costituenti. **Classificazione dello stato solido.** Introduzione all'uso delle unità di concentrazione delle soluzioni.

Esercitazioni: Rappresentazione di strutture geometriche relative a ibridizzazioni  $sp^3d^2$

**Unità di concentrazione delle soluzioni.** Definizione di soluzione e tipi di soluzioni : solide liquide gassose. Unità di concentrazione. Molarità (M) molalità (m) frazione molare (x), percentuale in peso (%p) , parti per milione (ppm). Esercitazioni numeriche sulle concentrazioni. **Stato fisico dei gas.** Descrizione delle variabili che caratterizzano un sistema gassoso: Pressione: equazione dimensionale-equivalenza tra millimetri di mercurio o Torr (mmHg/torr,) Pascal (Pa), bar, atmosfere. Volume e capacità: unità di misura e equivalenze. Temperatura assoluta Kelvin (K). Leggi dei gas: equazione di stato

dei gas ideali, calcolo della costante R, unità di misura della costante. Relazione quantità-volume, legge di Avogadro. Legge di Dalton, proprietà delle miscele gassose, calcolo delle pressioni parziali. Teoria cinetica molecolare dei gas. Osservazioni empiriche sulle proprietà dei gas nelle leggi dei gas. Effetto della massa molare sulla velocità molecolare. Gas reali deviazioni dal comportamento ideale. Equazione di van der Waals per i gas reali e significato delle costanti a e b nei fattori di correzione della pressione e del volume. Verifica dei limiti di applicabilità dell'equazione di stato.

Esercitazioni stechiometriche : Analisi indiretta. Cenni sulla chimica Nucleare. Il Nucleo: Le forze di legame del nucleo. Tipi di decadimento radioattivo. modelli di stabilità, rapporto neutroni/protoni e numeri magici. fissione e fusione concetti generali. Raggi cosmici e datazione Carbonio 14

**TERMOCHIMICA:** definizioni, funzione di stato, variabile di stato, sistemi aperti, chiusi e isolati. Energia: calore e lavoro. Quantificazione del calore, capacità termica specifica e molare. Lavoro: lavoro di espansione (pressione-volume). Equazione dimensionale. Relazione tra  $\Delta U$  e  $\Delta H$ . Reazioni esotermiche ed endotermiche. Definizioni di stato standard, entalpia di reazione e entalpia di formazione. Applicazione delle entalpie di formazione, legge di Hess.

Esercitazioni numeriche su unità di concentrazione e stato fisico dei gas

Applicazione e dimostrazione della legge di Hess. Calcolo di lavoro di espansione di un gas in modo reversibile e irreversibile. Enunciati I° e II° principio della termodinamica. Funzione di stato Entropia S. Processi spontanei: processi reversibili e irreversibili. Relazione tra entropia e calore. Disuguaglianza di Clausius. Entropia nei processi spontanei. III° principio della termodinamica; teorema di Nernst. Applicazione della relazione  $\Delta S_{\text{totale}} = \Delta S_{\text{sistema}} + \Delta S_{\text{ambiente}}$ , per la verifica del II° principio. Funzione di stato Energia Libera di Gibbs. Significato della funzione termodinamica come potenziale chimico. Temperatura di equilibrio a  $\Delta G = 0$ . Calcolo del  $\Delta H$ ,  $\Delta S$  e  $\Delta G$  di reazione e verifica spontaneità.

Esercitazioni numeriche su entalpia e energia interna

**Equazione di Clausius Clapeyron.** Uso dell'equazione per il calcolo della temperatura di ebollizione a pressioni diverse da 1 atmosfera. Diagrammi di Stato; significato fisico dei punti sul diagramma. Diagramma di stato dell'acqua e dell'anidride carbonica. Termodinamica della stato di soluzione: variazione della energia libera nel mescolamento di soluzioni in sistemi ideali e sistemi reali.

**Legge di Raoult:** soluzioni miscibili in condizioni ideali e non ideali liquido-liquido e liquido -solido (proprietà colligative) **Proprietà colligative:** abbassamento della tensione di vapore e variazione della temperatura di ebollizione e congelamento di un solvente in presenza di un soluto non volatile indissociato.

**Pressione osmotica:** membrana semipermeabile, variazione della energia libera nel passaggio solvente soluzione e misura della pressione. Dimostrazione del coefficiente o binomio di van't Hoff per applicazione delle proprietà colligative a elettroliti forti e deboli. Esercitazioni numeriche su proprietà colligative. Reazioni redox: bilanciamento

Esercizi riepilogativi su argomenti trattati

**Equilibrio chimico:** equilibrio omogeneo gassoso a T=costante relazione termodinamica tra  $\Delta G$  di reazione e costante di equilibrio  $K_p$ . Differenza tra quoziente Q e costante di equilibrio K. Influenza della temperatura sul valore della costante di equilibrio: equazione di van't Hoff. Conversione del  $K_p$  in  $K_c$  e  $K_x$ . Calcolo delle K di equilibrio in funzione della variazione del numero di moli gassose. Influenza della pressione, del volume e della concentrazione sugli equilibri omogenei gassosi. **Equilibri eterogenei solido/gas**, esempi e esercitazioni numeriche.

Esercizi riepilogativi su ossidoriduzioni

**Equilibrio di autoprotolisi dell'acqua. Acidi e basi**, reazioni di anidridi e ossidi con

acqua. Composti binari e ternari idracidi, ossoacidi. Basi ossidriliche effetto della elettronegatività del metallo sul legame OH. Definizioni di acido e di base secondo: Arrhenius, Bronsted-Lowry, Lewis. Forza degli acidi e delle basi. Effetto strutturali che influenzano la forza di un acido. Effetto della temperatura su reazione endotermica di autoprotolisi dell'acqua ( $\Delta H^\circ > 0$ ). Calcolo della costante di autoprotolisi, prodotto ionico,  $K_w$  a 25°C dal valore del  $\Delta G^\circ$ . **Calcolo del pH e pOH come cologaritmo delle concentrazioni di H<sup>+</sup> e OH<sup>-</sup>**. Soluzioni acide basiche neutre range di pH e pOH. Acidi e basi forti: calcolo del pH di soluzioni a concentrazione maggiore o minore di 10<sup>-6</sup>. Acidi e basi deboli: calcolo del pH di soluzioni a diverse concentrazioni e diverso valore della costante  $K_a$  o  $K_b$ . **Sali elettroliti forti in soluzione acquosa**. Comportamento di sali che non danno idrolisi e influenza sul pH della soluzione acquosa di sali che idrolizzano. Dissociazione di sali provenienti da ioni che derivano da acidi o basi deboli. Reazione di idrolisi. Costante di Idrolisi. Calcolo di pH di soluzioni di sali provenienti da base forte/acido debole e acido forte/base debole.

Esercizi riepilogativi su costanti di equilibrio

**Elettrochimica** definizioni sistemi capaci di trasformare energia chimica in lavoro reazioni redox. Descrizione di semielementi di prima specie, seconda specie a gas e redox. **Pila Daniell Zn/Cu**. Rappresentazione schematica di semielementi di 1° specie, redox e a gas: Bilanciamento di semireazioni redox con il metodo ionico elettronico. Relazione tra  $\Delta G/\Delta G^\circ$  e  $\Delta E/\Delta E^\circ$  e  $K$  equilibrio. **Equazione di Nernst**. Calcolo della fem di una pila. Relazione tra  $\Delta E$ ,  $K$ ,  $Q$ , termodinamica di equilibrio e quoziente di reazione. Elettrodo standard a idrogeno. Determinazione dei potenziali standard delle specie elettroattive. Pile a concentrazione

Esercizi riepilogativi su calcoli di pH

**Elettrolisi**: definizione del processo e aspetti quantitativi. Calcolo della quantità di carica, Legge di Faraday, Peso equivalente. Sovratensione di elettrolisi e caduta ohmica. Descrizione di celle commerciali primarie e secondarie. Accumulatori al piombo acido: processo di carica e di scarica.

Esercizi riepilogativi su pile chimiche

**Corrosione** galvanica e per aerazione differenziale

Esercitazioni numeriche su elettrolisi e leggi di Faraday

In occasione dell'anno celebrativo per i 150 anni della Tavola Periodica

il giorno 15/10/2019 Chiara Salvitti Ph. D. ha tenuto il seminario dal titolo "**Il sistema periodico: passato presente e futuro**". **PPT\_IYPT2019**