



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DELL'AQUILA

CORSI DI INGEGNERIA

A.A. 2017/2018

Chimica (I3D)

- Mucciante Vittoria -

(Aggiornato il 18-06-2018)

Contenuti del corso (abstract del programma):

Introduzione alla Chimica Proprietà della materia natura atomica della materia Struttura dell'atomo Proprietà periodiche degli elementi Il legame chimico Reazioni chimiche e nomenclatura Lo stato gassoso Le fasi condensate Termodinamica chimica Passaggi di stato Le soluzioni Proprietà colligative L'equilibrio chimico La dissociazione gassosa Soluzioni di elettroliti Acidi e basi Equilibri ionici in soluzione La cinetica chimica L'elettrochimica

Programma esteso:

Programma del Corso di Chimica La materia e i suoi stati di aggregazione; classificazione della materia. Le trasformazioni fisiche della materia: i cambiamenti di stato. Trasformazioni chimiche; le reazioni chimiche. L'atomo e le particelle subatomiche. Il numero atomico e la massa atomica. La tavola periodica degli elementi La natura atomica della materia. Lavoisier e la legge di conservazione delle masse. La struttura dell'atomo. I tubi a raggi catodici. La scoperta dell'elettrone. La carica dell'elettrone. La massa dell'elettrone. Il protone. Massa e carica del protone. Modello atomico di Thomson. La radioattività: raggi alfa, beta e gamma. L'esperienza di Rutherford ed il modello atomico planetario. La scoperta del neutrone; nuclidi ed isotopi. Il peso atomico: definizione e scelta della scala di riferimento. La radiazione elettromagnetica. Parametri di un'onda e.m. Lo spettro della radiazione e.m La teoria dei quanti e l'effetto fotoelettrico. Gli spettri atomici: spettri di emissione e di assorbimento. La costante di Rydberg. Il modello atomico di Bohr: postulati. Calcolo dei raggi e delle energie degli stati stazionari. L'interpretazione degli spettri atomici. Ampliamento del modello di Bohr. Sommerfeld ed il numero quantico angolare. Effetto Zeeman: il numero quantico magnetico. Lo spin. Il dualismo onda-particella: relazione di De Broglie. La diffrazione degli elettroni. Il principio di indeterminazione di Heisenberg. La meccanica ondulatoria: le onde stazionarie. L'equazione di Schrodinger. L'equazione d'onda per l'atomo di idrogeno; condizioni al contorno e autofunzioni. Autovalori. Gli orbitali atomici e i numeri quantici. Principio di esclusione di Pauli. Distribuzione di probabilità e funzione di distribuzione radiale. Rappresentazione degli orbitali: distribuzione della nuvola elettronica e curve di distribuzione di probabilità. Orbitali 1s e 2s. Orbitali 2p. Orbitali 3d. Energia degli orbitali atomici: atomo di idrogeno. Energia degli orbitali negli atomi polielettronici; carica nucleare effettiva. Principio di Aufbau e configurazione elettronica. Regola di Hund. Aufbau di atomi polielettronici. Le proprietà periodiche degli elementi; la tavola periodica degli elementi: descrizione. Volume atomico e raggio atomico. Raggio ionico. Energia di ionizzazione. Affinità elettronica. Massa molecolare e massa formula. La mole e il numero di

Avogadro. Massa molare. Calcolo della composizione percentuale e determinazione della formula minima dei composti. Il legame chimico: definizione. Energia di legame e distanza di legame. La regola dell'ottetto. Classificazione dei legami chimici. Il legame ionico: definizione e propriet . Il ciclo di Born-Haber. Il reticolo cristallino: il numero di coordinazione. L'energia reticolare. Il legame covalente: definizione. Formule di Lewis. Legame covalente omeopolare. Legami singoli, doppi e tripli. Legame covalente eteropolare. Eccezioni alla regola dell'ottetto. Legami polari e legami apolari: dipoli e momento di dipolo. Molecole polari. Elettronegativit : scala di Mulliken e scala di Pauling. Carattere ionico del legame covalente. Il legame covalente dativo. Strutture di Lewis. La risonanza. La carica formale. Il legame chimico secondo la meccanica quantistica. La teoria del legame di valenza (VB). La molecola di idrogeno; l'integrale di sovrapposizione. Legame sigma e legami pi-greco. Stati di covalenza degli elementi dal II al VII gruppo. La geometria delle molecole e gli orbitali ibridi. Energia e forma degli orbitali ibridi: ibridizzazione sp^3 , sp^2 , sp , sp^3d e sp^3d^2 . Molecole con legami multipli. La risonanza. Il modello VSEPR: modelli strutturali. Molecole tipo AX_2 , AX_3 , AX_4 , AX_5 , AX_6 , AX_2E , AX_2E_2 , AX_2E_3 , AX_3E , AX_3E_2 , AX_4E , AX_4E_2 , AX_5E . Propriet  magnetiche dei materiali. Teoria degli orbitali molecolari (MO). Il metodo LCAO. Orbitali molecolari di legame e di antilegame. Energia potenziale e livelli energetici. Regole di combinazione. La molecola H_2^+ ; ordine di legame. Forma degli orbitali molecolari. Configurazione elettronica delle molecole biatomiche omonucleari (H_2 , He_2^+ , He_2). Molecole biatomiche omonucleari del II periodo. Molecole con sistemi di elettroni delocalizzati. Il legame metallico: reticolo cristallino metallico. Teoria delle bande. Bande di conduzione e bande di valenza. Conduttori, semiconduttori e isolanti. Legami deboli: il legame idrogeno, interazioni Van der Waals. Lo stato gassoso; variabili di stato. Il modello di gas ideale. Leggi dei gas: legge di Boyle, di Charles, di Gay-Lussac. Principio di Avogadro. Volume molare. L'equazione di stato dei gas perfetti. La legge di Dalton delle pressioni parziali. La frazione molare. Legge di Graham. La teoria cinetica molecolare. Equazione di Maxwell-Boltzmann. Distribuzione delle velocit . I gas reali; coefficiente di compressibilit . Equazione di Van der Waals. Liquefazione dei gas: temperatura e pressione critici. La nomenclatura dei composti inorganici. Nomenclatura dei composti binari: Sali non ossigenati, ossidi e idruri. Nomenclatura dei composti ternari. Acidi ossigenati ed idrossidi. Sali ossigenati, sali acidi e sali basici. Nomenclatura di cationi ed anioni. Scrittura e bilanciamento delle reazioni chimiche. Relazioni ponderali nelle reazioni chimiche. Componente in difetto e reagente limitante. Il rendimento delle reazioni chimiche. Le fasi condensate della materia. I solidi: solidi amorfi e solidi cristallini. Isotropia ed anisotropia. Reticoli cristallini: la cella elementare e i parametri di cella. I sistemi cristallini. Allotropia, polimorfismo ed isomorfismo. Solidi ionici, covalenti, molecolari e metallici. I liquidi. Distribuzione delle velocit . Viscosit  e tensione superficiale. Termodinamica chimica. Sistemi termodinamici isolati, aperti e chiusi. Funzioni di stato. Grandezze intensive ed estensive. Energia interna, lavoro e calore. I principio della termodinamica. La funzione entalpia. Termochimica: determinazione dei calori di reazione. Reazione esotermiche ed endotermiche. Equazioni termochimiche: lo stato standard. Entalpie molari standard di reazione e di formazione. La legge di Hess. Equilibrio termodinamico; processi reversibili ed irreversibili. Trasformazioni spontanee. Funzione di stato entropia. Disuguaglianza di Clausius. Il principio della termodinamica. Entropia e stati microscopici. III principio della termodinamica. Entropia molare standard di formazione e di reazione. Energia libera. Equazione di Gibbs-Helmoltz. Energia libera molare standard di formazione e di reazione. Passaggi e diagrammi di stato: la tensione di vapore e il punto di ebollizione. Equazione di Clausius-Clapeyron. Entalpia nei passaggi di stato. Curve di raffreddamento e di riscaldamento. Equazione di Clapeyron. Regola delle fasi e varianza. Diagrammi di stato dei sistemi ad un componente (H_2O , CO_2 , S). Sistemi a due o pi componenti: le soluzioni. Soluzioni liquide, solide e gassose. Concentrazione delle soluzioni: percento in peso, frazione molare, molarit . Peso equivalente: acidi e basi, sali, specie ioniche. Le reazioni di ossido-riduzione:

bilanciamento con il metodo semplice e con il metodo ionico-elettronico. . Concentrazione delle soluzioni. Molalit. Solubilit; soluzioni sature. Entalpia di solubilizzazione. Soluzioni ideali. Meccanismo di solubilizzazione dei solidi ionici e molecolari; entalpia molare di solvatazione. Energia libera ed entropia di solubilizzazione. Solubilit di un gas in un liquido; legge di Henry. Soluzioni liquide; Legge di Raoult. Composizione della fase vapore. Diagrammi di stato dei sistemi a due componenti. Deviazioni positive e negative dalla legge di Raoult. Diagrammi di distillazione; azeotropi. Le propriet colligative (soluti non elettroliti). Abbassamento della tensione di vapore, innalzamento ebullioscopio ed abbassamento crioscopico. Pressione osmotica. Diagrammi di stato liquido-solido. Diagramma eutettico. Equilibrio chimico omogeneo. La costante di equilibrio in funzione delle pressioni parziali (K_p) e delle concentrazioni (K_c). La legge dell'azione di massa. Relazioni tra costanti di equilibrio. Relazione tra K_c e K_p . Relazione tra K_x e K_c . Quoziente di reazione. Il principio di Le Chatelier; aggiunta e sottrazione di reagenti e prodotti. Variazione della pressione. Derivazione termodinamica della costante di equilibrio. Energia libera e costante di equilibrio. Influenza della temperatura sulla costante di equilibrio. Equazione di Van't Hoff. Reazioni esotermiche ed endotermiche. Equilibrio chimico eterogeneo; formulazione della costante di equilibrio. La dissociazione gassosa. Grado di dissociazione e fattore di dissociazione. Costante di equilibrio e grado di dissociazione. Soluzioni di elettroliti. Teoria della dissociazione elettrolitica. Dissociazione e ionizzazione. Elettroliti forti e deboli. Grado di dissociazione. Concentrazione analitica e concentrazione ionica. Propriet colligative di soluzioni elettrolitiche di elettroliti forti e deboli. Conducibilit elettrica nelle soluzioni elettrolitiche. Conduttori di prima e seconda specie. Cinetica chimica. Cinetica e termodinamica delle reazioni chimiche. Velocit di reazione: velocit media e velocit istantanea. Equazione cinetica e costante cinetica di velocit. Parametri che influenzano la velocit di reazione. Ordine di reazione: ordine di reazione parziale e totale. Calcolo dell'equazione cinetica. Metodo delle velocit iniziali. Reazioni del I ordine; equazione integrata. Tempo di dimezzamento. Reazioni del II Ordine; equazione integrata. Reazioni di ordine zero. I meccanismi di reazione. La teoria delle collisioni; urti efficaci. Energia di attivazione. La teoria del complesso attivato. Lo stato di transizione. Profili di reazione. Reazioni esotermiche ed endotermiche. Equazione di Arrhenius. Reazioni semplici e reazioni complesse. La molecolarit dei processi elementari. Processi mono-, bi- e trimolecolari. Caratterizzazione dei processi elementari. Meccanismo di reazione e stadio cineticamente determinante. Costante di equilibrio e costante di velocit nei processi elementari. I catalizzatori: definizione e propriet. La catalisi omogenea: esempi. Catalisi eterogenea. Profilo di reazioni nelle catalisi omogenee ed eterogenee. Acidi e basi. Acidi e basi secondo Arrhenius. La reazione di neutralizzazione. Limiti della teoria. Acidi e basi secondo Brønsted e Lowry. Le coppie coniugate acido-base. Anfoteri. Reazioni di autoprotolisi. Forza degli acidi e delle basi. Costante di dissociazione di acidi e basi. Fattori strutturali che influenzano la forza di un acido. Acidi e basi poliprotici: acido carbonico e acido fosforico. Autoionizzazione dell'acqua. La costante K_w . Soluzioni acide, neutre e basiche. Il pH: definizione e applicazioni. Relazione tra K_w , pH e temperatura. Calcolo del pH di acidi e basi forti a diversa diluizione. Calcolo del pH di soluzioni di acidi e basi deboli. Calcolo del pH di soluzioni di acidi e basi poliprotici. Idrolisi salina: considerazioni generali. Sali tipo NaCl, sali tipo AcONa . La costante di idrolisi e il calcolo del pH. Sali tipo AcONH_4 . Calcolo del pH. Sali tipo NaHCO_3 . Calcolo del pH. Le soluzioni tampone. Tampone AcOH/AcONa . Propriet tamponanti. Tampone tipo $\text{NH}_3/\text{NH}_4\text{Cl}$. Tamponi tipo $\text{NaH}_2\text{PO}_4/\text{Na}_2\text{HPO}_4$. Effetto tampone in soluzioni concentrate di acidi e basi forti. Equilibri di solubilit. Il prodotto di solubilit dei sali poco solubili. La solubilit. Effetto dello ione a comune sulla solubilit. Reazioni di precipitazione. Previsioni sulla formazione di un precipitato. Il prodotto ionico. Effetto della variazione del pH sulla solubilit di basi poco solubili e sali tipo acido debole-base forte poco solubili. Elettrochimica. Energia chimica ed energia elettrica. Celle elettrochimiche: celle galvaniche e celle di elettrolisi. Il potenziale di elettrodo. La pila Daniell. Potenziale di diffusione. Le pile:

notazione schematica; catodo e anodo. Forza elettromotrice. L'equazione di Nernst. Convenzione dei segni. La scala dei potenziali standard. L'elettrodo standard ad idrogeno SHE. Calcolo delle f.e.m. dalla scala dei potenziali. Tipi di elettrodi Calcolo della f.e.m. di una pila con l'equazione di Nernst. Calcolo della costante di equilibrio di una reazione redox. Calcolo del potenziale standard dalla scala dei potenziali. Elettrodi di riferimenti. Elettrodo standard a idrogeno. Pile a concentrazione: calcolo della f.e.m. Elettrolisi: considerazioni generali. Polarit degli elettrodi. Leggi di Faraday. Equivalenti elettrochimici. Tensione di decomposizione. Forza controelettromotrice. Tensione pratica di elettrolisi. Rendimento di corrente e rendimento energetico. Ordine di scarica anodica e catodica. Elettrolisi dell'acqua in ambiente neutro, basico e acido.

Modalità d'esame:

Prove di Esame. Sono ammessi alla prova scritta solo gli studenti che avranno effettuato l'iscrizione on-line secondo le modalità riportate in: <http://segreteriavirtuale.univaq.it>; Gli studenti che non avranno effettuato l'iscrizione non saranno ammessi alla prova scritta; Lo studente può ritirarsi in qualsiasi momento durante la prova scritta. Gli studenti dovranno venire muniti di documento di riconoscimento e potranno utilizzare solo tavola periodica e calcolatrice. Si fa assoluto divieto dell'uso di telefoni cellulari, smartphone, tablet etc. La prova di esame consiste in n°4 esercizi numerici e n° 8 domande teoriche a risposta multipla da completare entro 2h 40min. Per ogni esercizio numerico è prevista una votazione max di 4 punti per un totale di 16 punti. Per ogni domanda teorica sono previsti 2 punti per ogni risposta esatta per un totale di 16 punti. La risposta sbagliata o la non risposta comporta la penalizzazione di 1 punto. Gli studenti che avranno riportato una votazione inferiore a 15 dovranno ripetere la prova. Gli studenti con una votazione compresa tra 15 e 17 (estremi inclusi) dovranno sostenere un colloquio integrativo sull'intero programma del corso. Gli studenti che avranno riportato una votazione uguale o superiore a 18 potranno: (a) accettare tale voto come voto di esame; (b) richiedere un colloquio integrativo sull'intero programma del corso che concorrà comunque alla definizione del voto finale. L'esame deve essere verbalizzato nella seduta d'orale dell'appello in cui è stata sostenuta la prova scritta. Prove Parziali: Per sostenere le prove parziali di Chimica è obbligatorio prenotarsi con il sistema S3. Possono sostenere le prove parziali di chimica soltanto gli studenti che acquisiscono la frequenza nell'anno di erogazione del corso. Gli studenti dovranno venire muniti di documento di riconoscimento e potranno utilizzare solo tavola periodica e calcolatrice. Si fa assoluto divieto dell'uso di telefoni cellulari, smartphone, tablet etc. La singola prova parziale consiste in n°3 esercizi numerici e n° 7 domande teoriche a risposta multipla da completare entro 2h 15min. Per ogni esercizio numerico è prevista una votazione max di 6 punti per un totale di 18 punti. Per ogni domanda teorica sono previsti 2 punti per ogni risposta esatta per un totale di 14 punti. La risposta sbagliata o la non risposta comporta la penalizzazione di 1 punto. Le prove parziali saranno 3. Il voto finale sarà dato dal voto medio delle 3 prove. Gli studenti che avranno riportato una votazione media inferiore a 15 dovranno sostenere la prova di esame. Gli studenti con una votazione compresa tra 15 e 17 (estremi inclusi) dovranno sostenere un colloquio integrativo sull'intero programma del corso. Gli studenti che avranno riportato una votazione uguale o superiore a 18 potranno: (a) accettare tale voto come voto di esame; (b) richiedere un colloquio integrativo sull'intero programma del corso che concorrà comunque alla definizione del voto finale.

Risultati d'apprendimento previsti:

Si considerano acquisiti i seguenti concetti: - La materia e l'energia: concetti base - Gli atomi, le molecole, e le particelle subatomiche - La struttura elettronica e la periodicità chimica - I legami chimici: legame ionico e legame covalente - Nomenclatura chimica e calcoli chimici; il concetto di mole. Le formule chimiche -

Equazioni chimiche e calcoli stechiometrici - Gli stati di aggregazione della materia - I gas e le relative leggi - Lo stato liquido; le soluzioni e le unit di misura delle concentrazioni delle soluzioni - Acidi basi e sali: il pH - Velocità di reazione ed equilibrio chimico - Elettrochimica: ossidazione e riduzione

Testi di riferimento:

Teoria: Schiavello Palmisano "Fondamenti di Chimica" EdiSes

oppure Oxtoby "Chimica Moderna" EdiSes

Esercizi: Silvestroni, Rallo "Calcoli Stechiometrici" CEA