

FONDAMENTI DI CHIMICA T

Corso di Laurea in Ingegneria Meccanica

A.A. 2017/2018 – Docente: Prof. Andrea Munari

La struttura atomica della materia

Atomi e molecole. Le particelle fondamentali della materia ed i primi modelli atomici: il modello di Rutherford. Numero atomico e numero di massa; nuclídi e isotopi. Pesi atomici relativi e assoluti; l'unità di massa atomica. La mole ed il numero di Avogadro; la massa molare.

La struttura del nucleo atomico: la radioattività ed i processi nucleari

Nuclídi stabili e radionuclídi. La radioattività: caratteristiche dei diversi tipi di emissioni; la cinetica del decadimento radioattivo. Cenni alle famiglie radioattive naturali. Il difetto di massa. La fissione nucleare e sue applicazioni; i vari tipi di reattori nucleari: reattori termici e veloci, BWR, PWR, ecc. Cenni sulla fusione nucleare. Principali impieghi dei radioisotopi, in particolare del ^{14}C

La struttura elettronica degli atomi

Generalità sulle onde elettromagnetiche; l'effetto fotoelettrico. Lo spettro di emissione dell'atomo di idrogeno. Limiti dei modelli atomici: il principio di indeterminazione di Heisenberg. La natura dualistica della luce e degli elettroni; le onde di De Broglie. L'equazione di Schrödinger e sua applicazione al caso dell'atomo di idrogeno in stato stazionario. Orbitali atomici e numeri quantici. L'assorbimento e l'emissione di radiazioni elettromagnetiche. Gli atomi con più elettroni; lo *spin* dell'elettrone ed il numero quantico di *spin*: il principio di esclusione di Pauli e la regola di Hund. Il riempimento progressivo degli orbitali atomici; descrizione della configurazione elettronica nello stato fondamentale dei principali elementi. La Tavola Periodica degli elementi; le principali proprietà periodiche e loro andamento lungo i Gruppi ed i Periodi.

Il legame chimico

Concetti di legame chimico e di energia di legame. I vari tipi di legame chimico. Il legame ionico. Bilancio energetico nella formazione del cristallo ideale di NaCl . Valenza ionica. Il legame covalente: generalità. Legami semplici e legami multipli: legami di tipo σ e di tipo π . Cenni alla regola dell'ottetto e alle sue eccezioni. I legami di coordinazione. La teoria del legame di valenza (VB): cenni alla sua applicazione alla molecola H_2 . La valenza degli atomi sulla base delle configurazioni elettroniche; gli stati eccitati. Gli orbitali ibridi e la geometria molecolare; gli ibridi sp , sp^2 , sp^3 ; cenni ad altri tipi di ibridazione. Cenni alla teoria *VSEPR*. Legami polarizzati; molecole polari ed apolari. Le strutture limiti di risonanza. La teoria degli orbitali molecolari (OM): generalità e cenni all'applicazione al caso di molecole biatomiche omonucleari. Il legame metallico: proprietà principali dei solidi metallici; il modello a bande nei solidi. Conduttori e isolanti. I semiconduttori elementari e composti; drogaggio dei semiconduttori con elementi accettori e donatori: semiconduttori di tipo *p* e di tipo *n*. I legami deboli: legame a ponte di idrogeno, legami ione-dipolo, ecc..

Le reazioni chimiche

Significato delle formule chimiche e delle equazioni stechiometriche; reazioni reversibili ed irreversibili. Il numero di ossidazione e sua determinazione. La nomenclatura tradizionale e quella *IUPAC* per i composti *inorganici* ed *organici* più comuni. Bilanciamento delle reazioni, in particolare di quelle di ossidoriduzione; concetti di ossidante e di riducente. Il metodo diretto e quello delle semireazioni. Reazioni di dismutazione. Calcoli stechiometrici

Gli stati di aggregazione della materia

Lo stato gassoso: il modello del gas ideale e l'equazione di stato dei gas. Le miscele di gas ideali: le leggi di Dalton e di Amagat. Cenni ai gas reali: il fattore di comprimibilità. La temperatura critica e sua importanza nel processo di liquefazione dei gas.

Lo stato liquido: la pressione di vapore e la temperatura di ebollizione. Le soluzioni: definizione e i diversi modi di esprimerne la composizione: frazione molare, frazione ponderale, molarità, ecc. La solubilità di un gas e di un solido in un liquido e sua dipendenza da pressione e temperatura.

Lo stato solido: solidi amorfi e solidi cristallini; il reticolo cristallino e la cella elementare. Cenni ai sistemi cristallografici e ai vari tipi di celle elementari. Le celle cristalline compatte: *EC*, *CCC*, *CFC*. Spiegazione in termini di celle compatte della struttura di numerosi solidi metallici e ionici. Le caratteristiche principali dei vari

tipi di solidi cristallini (metallici, ionici, molecolari, covalenti, con struttura a strati o a catene). Polimorfismo ed allotropia. Le differenti forme allotropiche del carbonio e loro struttura: diamante, grafite, fullereni, nanotubi, grafene. I principali difetti nei cristalli: difetti di punto, di linea e di superficie.

Cinetica chimica

La velocità di reazione. L'equazione cinetica nella sua forma canonica: limiti di validità. Gli ordini parziali e l'ordine totale di reazione. Cinetica delle reazioni del I ordine; il tempo di semitrasformazione. Effetto della temperatura sulla velocità di reazione: generalità. L'equazione di Arrhenius e cenni alla sua interpretazione sulla base della teoria delle collisioni molecolari. Il complesso attivato e l'energia di attivazione. Cenni alla cinetica delle reazioni in soluzione. I catalizzatori: proprietà generali; catalisi omogenea ed eterogenea.

Termodinamica chimica

Richiami di Termodinamica. Il primo principio: equivalenza tra lavoro e calore; l'energia interna e suo significato. L'entalpia. La capacità termica, il calore specifico e quello molare. Termochimica: le equazioni termochimiche. Lo stato standard per solidi, liquidi e gas; entalpie standard di reazione, di formazione e di combustione. La legge di Hess e sue applicazioni. L'equilibrio chimico da un punto di vista cinetico. Espressioni della costante di equilibrio per sistemi gassosi ideali: K_p e K_c e loro significato. Calcolo del rendimento massimo di una reazione e della composizione all'equilibrio. Reazioni eterogenee. Lo spostamento dell'equilibrio: effetto di una variazione della concentrazione di alcuni componenti, di variazioni della temperatura (equazione di Van't Hoff) e della pressione; effetto della presenza di un gas inerte.

Equilibri ionici in soluzione: l'autoprotolisi dell'acqua ed il prodotto ionico. Soluzioni acide, neutre e basiche: il pH di una soluzione; il pOH. Acidi e basi secondo Arrhenius e secondo Brønsted e Lowry. Le reazioni acido-base. La forza di un acido e quella della sua base coniugata. Le reazioni di idrolisi. Gli equilibri di solubilità.

Equilibri tra fasi diverse

La regola delle fasi e sua applicazione. L'equazione di Clausius-Clapeyron e sua applicazione per l'interpretazione del diagramma di stato di un componente puro: il diagramma di stato dell'acqua e quello di CO_2 . Cenni alle proprietà colligative delle soluzioni. Diagrammi di stato a due componenti; l'equilibrio liquido-solido: alcuni casi semplici. Diagrammi di stato relativi agli equilibri liquido-vapore. I diagrammi isotermi: le soluzioni ideali e la legge di Raoult. Cenni alle soluzioni non ideali; le soluzioni azeotropiche. I diagrammi isobari e cenni alla distillazione frazionata.

Elettrochimica

Conduttori ionici e conduttori elettronici. Le pile: la pila Daniell. I potenziali elettrodi e loro origine. Forza elettromotrice di una pila e differenza di potenziale prelevabile. L'elettrodo standard a idrogeno e la serie dei potenziali standard di riduzione: la *serie elettrochimica*. L'equazione di Nernst e sua applicazione al calcolo della *f.e.m.* di una pila e del potenziale di riduzione di un semielemento. Le pile di concentrazione e quelle ad espansione di gas; cenni al funzionamento della *sonda lambda*. Fenomeni elettrolitici: generalità. Il potenziale termodinamico di decomposizione e la sovratensione. Le leggi di Faraday. La corrosione elettrochimica dei metalli: corrosione galvanica e per aerazione differenziale; metodi di protezione.

Testi consigliati:

R.A. Michelin, A. Munari – *FONDAMENTI DI CHIMICA* - CEDAM, Padova, III Ed. (2016).

R.A. Michelin, M. Mozzon, P. Sgarbossa, A. Munari – *CHIMICA DI BASE Test ed Esercizi* - CEDAM, Padova (2015).