

CHIMICA GENERALE E INORGANICA

(Titolare: Prof. MAURO SAMBI)

Periodo: I anno, I e II semestre

Commissione di profitto: Prof. MAURO SAMBI (PO) – Presidente,

Prof. FRANCESCO SEDONA (PA) – Componente, Prof. MAURIZIO CASARIN (PO) – Supplente

Tipologie didattiche: 64A+30E+24L; 13,00 CFU

Sede dell'insegnamento: Dipartimento di Scienze Chimiche, Aula A "Nasini"

Obiettivi formativi:

Le lezioni in aula sono intese a fornire una prima alfabetizzazione chimica rigorosa agli studenti che si accingono allo studio della disciplina. Le lezioni di teoria tengono conto della preparazione eterogenea degli studenti del primo anno di corso e della loro formazione matematica in fieri; tuttavia intendono sottolineare fin dal primo approccio la natura di scienza esatta della disciplina, col necessario corredo logico-matematico che deve far parte del bagaglio culturale del chimico. Parti più discorsive saranno dunque alternate ad alcuni argomenti selezionati, trattati perlopiù come obiettivi secondari, che prevedono l'uso di modelli semplici ma affrontati quantitativamente, per familiarizzare gli studenti con gli strumenti della dimostrazione e della derivazione di un risultato a partire da ben precise ipotesi tradotte in equazioni. Tutti gli argomenti del corso, per quanto possibile in ciascun ambito, saranno costantemente ricondotti alle proprietà periodiche degli elementi e alla conoscenza della tavola periodica.

La parte di esercitazioni prevede l'acquisizione degli elementi di base della stechiometria, cioè degli aspetti numerici dei più semplici concetti chimici. Le esperienze di laboratorio consentono l'acquisizione di conoscenze relative alle norme di prevenzione e sicurezza nell'uso di sostanze chimiche e alle norme comportamentali e di pronto intervento in caso di incidenti, nonché la familiarizzazione con vetreria ed altre semplici apparecchiature e con le procedure di uso più comune nei laboratori chimici.

Viene di seguito esplicitato il contenuto dettagliato del corso d'aula, delle esercitazioni numeriche e dell'attività di laboratorio.

I contenuti elencati devono considerarsi materia d'esame obbligatoria e sono trattati al livello dei testi consigliati:

1. "Principles of Modern Chemistry, 8th Edition", **D. W. Oxtoby, H. P. Gillis, J. P. Butler**, Ed. Brooks/Cole, Cengage Learning, 2015; Traduzione Italiana: **"Chimica Moderna", Edises, Napoli**, 2017 (V edizione), 2012 (IV edizione); o in alternativa:
2. **"Chimica Generale – Principi e applicazioni moderne", R. H. Petrucci, F. G. Herring, J. D. Madura, C. Bissonnette, Piccin, Padova**, 2018; "Soluzione degli esercizi", Piccin, Padova, 2014.

Per ogni tematica vengono anche indicati alcuni approfondimenti, comunque affrontati al livello dei testi consigliati, con integrazioni da:

3. "Principi di Chimica", P. Atkins, L. Jones, L. Laverman, Ed. Zanichelli, 2018.
4. "Principles of Chemistry", M. Munowitz, Ed. Norton, 2000.

Metodi didattici: Lezioni in aula; esercitazioni numeriche in aula; esercitazioni di laboratorio.

Contenuto dell'attività formativa:

LEZIONI IN AULA (I Semestre)

Introduzione al metodo scientifico. Osservazione, legge, ipotesi, teoria, verifica sperimentale, modello. Linguaggio simbolico – matematico.

Sistemi e unità di misura. Indeterminazione sperimentale – errori casuali e sistematici. Accuratezza e precisione. Introduzione alle proprietà fisiche.

Stati di aggregazione della materia. Miscele (eterogenee, omogenee) e sostanze pure. Elementi e composti; atomi e molecole.

La teoria atomistica: leggi di Proust e di Gay-Lussac, ipotesi di Dalton, legge delle proporzioni multiple, ipotesi di Avogadro. La tavola periodica di Mendeleev. Introduzione alla tavola periodica moderna: periodi e gruppi, nomenclatura. Cenni preliminari alla struttura elettronica a gusci successivi e periodicità delle proprietà atomiche.

Particelle subatomiche. Il numero atomico e il numero di massa. Isotopi. L'unità di massa atomica.

La massa atomica relativa. La mole. Identità numerica di massa atomica relativa e massa molare. Composizione chimica. Percentuali in massa, formula minima, formula molecolare. Tipi di legame. Legame covalente, ionico e metallico. Ossidazione e riduzione. Elettronegatività di Pauling e di Mulliken. I numeri di ossidazione e la loro determinazione.

Il legame chimico I: Le strutture di Lewis. Gli elettroni di valenza. Doppie di legame e di non legame. La regola dell'ottetto. Determinazione delle strutture di Lewis: computo degli elettroni di valenza, scelta dell'atomo centrale, distribuzione degli elettroni, computo e minimizzazione della carica formale, formule limite di risonanza. Metodo VSEPR per la determinazione della struttura molecolare. Cenni di nomenclatura inorganica.

Approfondimenti: La struttura dell'atomo in prospettiva storica: gli esperimenti di Thomson sui raggi catodici – esistenza, natura corpuscolare e rapporto e/m dell'elettrone. Il modello atomico "plum pudding". L'esperimento della goccia d'olio di Millikan: la carica assoluta dell'elettrone. L'esperimento del foglio d'oro di Rutherford – il modello nucleare dell'atomo.

La struttura dell'atomo secondo la meccanica quantistica. Introduzione. Lo spettro elettromagnetico. L'emissione del corpo nero. L'effetto fotoelettrico. Gli spettri a righe di emissione e di assorbimento. La quantizzazione dell'energia. Cenni all'atomo di Bohr e suoi limiti. Il principio di indeterminazione di Heisenberg. Il concetto di probabilità di trovare l'elettrone in una regione dello spazio. La funzione d'onda. De Broglie: dualità onda-particella. L'equazione di Schrödinger.

Approfondimenti: la soluzione dell'equazione di Schrödinger per la particella nella scatola monodimensionale.

Le soluzioni dell'equazione di Schrödinger per l'atomo monoelettronico. Parte radiale e parte angolare della funzione d'onda. I numeri quantici n , l , m_l . Orbitali $1s$, $2s$ e $3s$. Nodi totali, nodi radiali, nodi angolari. Orbitali atomici di tipo p , d ed f . Parte radiale e parte angolare. Lo spin dell'elettrone. Il numero quantico momento di spin. Introduzione agli atomi polielettronici. La carica nucleare efficace. La capacità di penetrazione. Modello a gusci dell'atomo. Diagramma dei livelli per atomi polielettronici. Principio dell'Aufbau. Principio di esclusione di Pauli. Regola di Hund.

Proprietà periodiche: dimensioni degli atomi, raggio atomico – andamento ed eccezioni. Energia di ionizzazione, raggi ionici, affinità elettronica, elettronegatività, tipi di legame. Stechiometria degli idruri e degli ossidi binari. Proprietà acido/base degli ossidi.

Il legame chimico II. Teoria LCAO-MO. La molecola di idrogeno, gli orbitali molecolari σ di legame e di antilegame. L'ordine di legame. Criteri per determinare l'esistenza di una molecola stabile. Gli orbitali molecolari σ_p e π_p . Schema dei livelli energetici per molecole biatomiche omonucleari ed eteronucleari. Paramagnetismo ed ordine di legame della molecola di ossigeno. Ione superossido e perossido. La molecola di HF .

Cenni alla teoria VB e confronto con la teoria MO. Gli orbitali ibridi del carbonio.

Introduzione ai gas. Pressione atmosferica. Misura della pressione. Legge di Boyle. Comprimibilità isoterma. Legge di Charles e Gay-Lussac. La legge di Amontons. La scala di temperatura del gas perfetto. Trasformazioni isobare, isocore, isoterme. La legge di Dalton delle pressioni parziali. Teoria cinetica dei gas. Derivazione della relazione tra energia cinetica media e temperatura per un gas ideale monoatomico.

Enunciazione e commento della distribuzione di Maxwell-Boltzmann delle velocità molecolari. Velocità, modale, media, radice quadrata della velocità quadratica media. Effusione: legge di Graham.

Approfondimenti: cenni sulla derivazione dell'equazione di MB

Gas reali. Fattori di compressione. Isoterme di un gas reale: CO_2 . Punto critico e variabili critiche. Condensazione del vapore. Equazione di Van der Waals – sua derivazione in base a considerazioni sulla struttura e sulle interazioni microscopiche.

Approfondimenti: Calcolo delle variabili critiche e della temperatura di Boyle a partire dall'equazione di van der Waals.

Interazioni intermolecolari. Definizione e classificazione. L'interazione ione-dipolo e dipolo-dipolo. Forze di dispersione di London. Il ponte a idrogeno. HF , acqua, struttura secondaria delle proteine. Cenni sulla struttura dei solidi: reticoli, strutture cubiche compatte.

Introduzione all'equilibrio chimico. La legge di azione di massa. Definizione di K_p e K_c . Costanti per equilibri in fase eterogenea. Significato di K_{eq} . K_{eq} per la reazione inversa. Conversione tra K_p e K_c . Principio di Le Chatelier. Influenza delle variazioni di concentrazione, di temperatura e di pressione sull'equilibrio chimico.

Introduzione alla termodinamica chimica. Energia, calore e lavoro. Prima legge della termodinamica. Energia interna come funzione di stato. Lavoro di pressione-volume.

Approfondimenti: Valutazione di q e w per un'espansione libera, un'espansione isoterma contro una pressione costante, un'espansione isoterma reversibile del gas ideale.

Calore scambiato a volume costante e a pressione costante: definizione di entalpia. Diagrammi entalpici. Legge di Hess. Entalpia standard di formazione, di reazione, di transizione di fase. Ciclo di Born-Haber.

Approfondimenti: Calore specifico e capacità termica. Capacità termica a volume costante e a pressione costante. Bomba calorimetrica. Esempi di calcolo di calori scambiati.

La seconda legge della termodinamica. Definizione termodinamica di entropia (Clausius). Entropia assoluta e terza legge della termodinamica. Calcolo dell'entalpia standard di reazione.

L'energia libera di Gibbs. Criteri di spontaneità di una reazione chimica.

Definizione statistica di entropia (Boltzmann) e dimostrazione della sua equivalenza con la definizione termodinamica per l'espansione del gas ideale.

Enunciazione e commento della relazione tra costante di equilibrio e variazione di energia libera di Gibbs standard.

Approfondimenti: Derivazione della relazione esistente tra costante di equilibrio e variazione di energia libera di Gibbs standard. Dipendenza dalla temperatura della costante di equilibrio: l'equazione di Van't Hoff.

Introduzione ai diagrammi di fase p , T per un componente puro. Curve di equilibrio di fase solido-liquido, liquido-vapore e solido-vapore. Enunciazione e commento della regola delle fasi. Diagramma di fase del biossido di carbonio, dell'acqua e dello iodio. Variabili critiche, fluidi supercritici.

Diagrammi di fase per miscele a due componenti entrambi volatili. Diagrammi p - composizione, legge di Raoult. Composizione del vapore in equilibrio con il liquido. Deviazioni dall'idealità. Diagrammi T - composizione. Distillazione. Miscele azeotropiche.

Miscela a due componenti di cui uno non volatile. Introduzione alle proprietà colligative. L'abbassamento relativo della tensione di vapore. Innalzamento ebullioscopico e abbassamento crioscopico. Pressione osmotica.

Introduzione all'elettrochimica. Esempi di celle galvaniche e nomenclatura delle parti (anodo, catodo, ponte salino, ecc), forza elettromotrice. Potenziale standard di riduzione. Elettrodo standard a idrogeno. Serie elettrochimica dei potenziali di riduzione. Misura della fem standard di cella. Relazione tra ΔE^0 , ΔG^0 e K_{eq} . Criteri di spontaneità. Comportamento dei metalli nei confronti degli acidi. Combinazione dei ΔE di semireazione. Dipendenza della fem dalla concentrazione. Enunciazione e commento dell'equazione di Nernst. Le celle a concentrazione. Le pile commerciali. Pila a secco, pila alcalina, pila argento-zinco, accumulatore al piombo, pila nichel-cadmio, celle a combustibile. Corrosione e protezione dalla corrosione.

Approfondimenti: Derivazione dell'equazione di Nernst.

L'elettrolisi. Leggi di Faraday. La sovratensione. Processi elettrolitici industriali: elettrorefinazione, electroplating, il processo cloro-soda.

Cenni di cinetica delle reazioni chimiche. La velocità di reazione. L'ordine di reazione. Reazioni di ordine zero, del primo e del secondo ordine in forma differenziale ed integrale. Tempo di dimezzamento.

Modelli teorici della cinetica chimica. La teoria delle collisioni. L'energia di attivazione. Lo stato di transizione. Il complesso attivato. Il profilo di reazione. Effetto della temperatura sulla velocità di reazione. L'equazione di Arrhenius. Meccanismi di reazione. Processi elementari. Il rate-determining step. Catalizzatori.

Testi consigliati:

1. "Principles of Modern Chemistry, 8th Edition", D. W. Oxtoby, H. P. Gillis, J. P. Butler, Ed. Brooks/Cole, Cengage Learning, 2015; Traduzione Italiana: "Chimica Moderna", Edises, Napoli, 2017 (V edizione), 2012 (IV edizione); o in alternativa:
2. "Chimica Generale – Principi e applicazioni moderne", R. H. Petrucci, F. G. Herring, J. D. Madura, C. Bissonnette, Piccin, Padova, 2018; "Soluzione degli esercizi", Piccin, Padova, 2014.

ESERCITAZIONI NUMERICHE IN AULA (I semestre):

Prevedono lo svolgimento di esercizi e dimostrazioni relativi agli argomenti trattati nelle lezioni in aula, con le quali sono strettamente coordinate. In particolare saranno proposti esercizi sui seguenti argomenti: Unità di massa chimica, numero di Avogadro, mole. Bilanciamento chimico in forma molecolare/ionica. Bilancio massa/carica. Bilanciamento di reazioni non-redox. Bilanciamento di reazioni redox con i metodi dei numeri di ossidazione e delle semireazioni. Concentrazione e diluizione.

Analisi volumetrica. Legge di azione di massa. Elettroliti (forti/deboli) e ioni complessi. Acidi e basi forti/deboli. Grado di dissociazione. Idrolisi dei sali. Soluzioni tampone da sali acidi e/o basici. Prodotto di solubilità. Ione comune. Calcolo della f.e.m. di una pila. Relazione tra f.e.m. e costante di equilibrio. Elettrolisi. Leggi di Faraday.

Testi Consigliati:

1. "Stechiometria per la Chimica Generale", P. Michelin Lausarot, G. A. Vaglio, Piccin, Padova, 2005.
2. Materiale integrativo fornito dal docente.

ESERCITAZIONI DI LABORATORIO (II semestre)

(1) Caratteristiche di Alcuni Processi Chimici e Fisici (reazioni acido/base, salificazione, processi endo/esotermici,...); (2) Esperimenti di Elettrochimica (reazioni redox, pila Daniell, elettrolisi dell'acqua); (3) Equilibrio Chimico (effetto della concentrazione, della temperatura e dello ione comune) (4) Titolazioni Acido-Base (titolazioni forte/forte e debole/forte); (5) Distillazione di una soluzione acquosa di acido cloridrico; (6) Ciclo del Rame (reazioni redox, acido/base, precipitazione... applicate alla chimica acquosa del rame).

Testi Consigliati:

1. Dispense di Laboratorio.