

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA  
DIPARTIMENTO DI SCIENZE

---

---

**Programma di insegnamento per l'a.a. 2015-2016**

Insegnamento: chimica fisica

Docente: luciano d'alessio

Corso di studio: biotecnologie

Anno di corso: secondo

Periodo didattico: primo semestre

Tipologia: A

Totale crediti: 6

Tipo esame: scritto orale pratico

Valutazione: voto

Lingua di insegnamento: italiano

Inizio corso 1 ottobre 2015 Fine corso 15 gennaio 2016

**APPELLI DI ESAME**

Mese	Anno	Appello previsto
Febbraio	2016	16
Marzo	2016	15
Aprile	2016	
Maggio	2016	17
Giugno	2016	
Luglio	2016	12
Settembre	2016	
Ottobre	2016	18
Novembre	2016	
Dicembre	2016	13
Gennaio	2017	

**COMMISSIONE ESAME:**

Presidente: luciano d'alessio

Componente: camilla minichino

Componente: roberto teghil

Componente: angela de bonis

**ORARIO RICEVIMENTO STUDENTI**

<i>GIORNO</i>	<i>DALLE ORE</i>	<i>ALLE ORE</i>	<i>PRESSO</i>
LUNEDI'			
MARTEDI'	15	17	Stanza 3d104
MERCOLEDI'			

# UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA

## DIPARTIMENTO DI SCIENZE

---

---

GIOVEDI'			
VENERDI'			

### Eventuali prerequisiti:

---

### Obiettivi formativi:

\_\_\_ Il corso si propone di fornire gli strumenti concettuali e metodologici della termodinamica, della cinetica e della strutturistica molecolare, con particolare riferimento alle applicazioni biologiche e mediche.

Oltre a conoscere i contenuti propri della disciplina, gli studenti dovranno acquisire le tecniche di modellizzazione fisico-matematica dei sistemi complessi e la loro simulazione al computer utilizzando programmi commerciali e risorse di rete.

Il conseguimento dei crediti è subordinato allo sviluppo di un breve progetto o elaborato originale, su una tematica scelta dallo studente, documentato mediante consultazione della letteratura scientifica internazionale e di qualificati siti web.

---

### Programma del corso

\_\_\_ Materia ed energia, sistemi termodinamici, variabili di stato, stati di equilibrio, funzioni di stato, principio zero, equazione di stato, superficie caratteristica, gas perfetto, gas reali, interazioni intermolecolari, fattore di compressibilità, equazioni di stato del viriale, equazione di Van der Waals, parametri critici, variabili ridotte, stati corrispondenti.

Primo principio, energia interna, lavoro, calore, calore specifico, calore molare, coefficienti di espansione termica e di compressibilità isoterma, entalpia, cicli termodinamici, dipendenza dell'energia interna e dell'entalpia dalle variabili di stato, processi isotermi e adiabatici.

Termochimica, legge di Hess, equazioni termochimiche, cicli termochimici, entalpia standard di reazione, entalpia di formazione, entalpia di combustione, entalpia di atomizzazione, entalpia di legame, equazione di Kirchhoff e sua integrazione.

Trasformazioni reversibili e irreversibili, secondo principio, macchine termiche e macchine frigorifere, rendimento, coefficiente di prestazione, ciclo di Carnot, entropia e probabilità, dipendenza dell'entropia dalle variabili di stato, terzo principio, entropia assoluta, lavoro massimo, energia libera ed entalpia libera, bioenergetica, ciclo dell'ATP.

Condizioni di equilibrio, equilibri di fase, diagrammi di stato, equazione di Clausius-Clapeyron e sua integrazione, potenziale chimico, interfase liquido-vapore, tensione superficiale, variazione di energia libera standard di una reazione, equilibrio chimico.

Crisi della meccanica classica, radiazione del corpo nero, effetto fotoelettrico, effetto Compton, quantizzazione dell'energia, spettroscopia e struttura dell'atomo.

Natura ondulatoria della materia, onde stazionarie, funzioni d'onda, equazione di Schrodinger, problemi quantistici risolubili esattamente, particella libera, particella nella scatola, oscillatore armonico, effetto tunnel, rotatore rigido, atomo d'idrogeno, atomi polielettronici, molecole biatomiche e poliatomiche, metodi di approssimazione.

Elementi di meccanica quanto-relativistica, trasformazioni di Lorenz, quadrivettori, norma, cono di luce, massa ed energia, prove sperimentali, equazione di Dirac, positroni e anti-materia, effetti relativistici in chimica.

Velocità di reazione, ordine di reazione, meccanismo, molecolarità, reazioni di ordine zero, primo, secondo, tempo di dimezzamento, decadimento radioattivo, datazione con radiocarbonio, polarimetria, inversione del saccarosio, reazioni parallele, consecutive, opposte, equazione di Arrhenius, energia di attivazione, teoria dello stato di transizione, catalisi omogenea, eterogenea, enzimatica.

# UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA

## DIPARTIMENTO DI SCIENZE

---

---

Sistemi oscillanti, reazione di Belousov-Zhabotinsky, modello di Lotka-Volterra, caos deterministico, effetto farfalla, esponenti di Ljapunov, determinismo e irreversibilità.

Sistemi disordinati, elementi di geometria frattale, curva di Koch, polvere di Cantor, tappeto di Sierpinski, spugna di Menger, dimensione frattale e sua determinazione, analisi d'immagini, simulazioni al computer, variabili aleatorie, generatori di numeri casuali, metodi di Monte Carlo, aggregazione, percolazione, moto Browniano, diffusione nei mezzi disordinati, cenni sulla termodinamica dei sistemi complessi, strutture dissipative.

---

### Metodi didattici

---

### Modalità di verifica dell'apprendimento

\_\_\_ Esame scritto, esame orale, discussione tesina

---

### Testi di Riferimento

\_\_\_ Peter Atkins, Julio de Paula, Elementi di chimica fisica, Zanichelli

---

### Altre informazioni:

---

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA  
DIPARTIMENTO DI SCIENZE

---

---

Syllabus a.a. \_\_\_\_\_

Course: \_\_\_\_\_ Physical Chemistry \_\_\_\_\_

Professor: \_\_\_\_\_ Luciano D'Alessio \_\_\_\_\_

Course of studies: \_\_\_\_\_ Biothecnology \_\_\_\_\_

Academic Year: \_\_\_\_\_ II \_\_\_\_\_

ECTS: \_\_\_\_\_

Teaching Methods: Lectures – Lab. Activities – e-learning

Evaluation Method: oral, written, practical \_\_\_\_\_

Evaluation: \_\_\_\_\_ (score on 30 points/qualificazioni)

Semester: \_\_\_\_\_ I \_\_\_\_\_

Language: ITALIAN

Course beginning on \_\_\_\_\_ 1 october 2015 \_\_\_\_\_ ending on \_\_\_\_\_ 31 december 2016 \_\_\_\_\_

**CALLS FOR EXAMINATION**

Month	Year	Expected call
February	2016	16
March	2016	15
April	2016	
May	2016	17
June	2016	
July	2016	12
September	2016	
October	2016	18
November	2016	
December	2016	13
Juanyary	2017	

**EXAMINATION PANEL:**

President: \_\_\_\_\_ luciano d'alessio \_\_\_\_\_

Member: \_\_\_\_\_ camilla minichino \_\_\_\_\_

Member: \_\_\_\_\_ roberto teghil \_\_\_\_\_

Member: \_\_\_\_\_ angela de bonis \_\_\_\_\_

**Previous requirements:**

---

**Learning Outcomes:**



# UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA

## DIPARTIMENTO DI SCIENZE

---

The course aims to provide the conceptual and methodological tools of thermodynamics, kinetics and molecular structural chemistry, with particular reference to biological and medical applications.

The achievement of credits is subject to the development of a project brief or elaborate original, on a topic chosen by the student, documented by the international literature and consultation with qualified websites.

---

### **Syllabus:**

Matter and energy, thermodynamic systems, state variables, equilibrium states, state functions, principle zero, equation of state, surface feature, ideal gas, real gases, intermolecular interactions, compressibility factor, virial equations of state, equation van der Waals, critical parameters, reduced variables, corresponding states.

First law, internal energy, work, heat, specific heat, molar heat, thermal expansion coefficients and isothermal compressibility, enthalpy, thermodynamic cycles, dependence of the internal energy and enthalpy of the state variables, processes, isothermal and adiabatic coefficient adiabatic compressibility, speed of sound in a gas, expanding isoenthalpic, Joule-Thompson coefficient, curve inversion, liquefaction of gas, polytropic transformations.

Thermochemistry, Hess law, thermochemical equations, thermochemical cycles, standard enthalpy of reaction, enthalpy of formation, enthalpy of combustion, enthalpy of atomization, bond enthalpy, Kirchhoff equation and its integration.

Reversible and irreversible transformations, the second law, heat engines and refrigeration equipment, efficiency, coefficient of performance, Carnot cycle, entropy and probability, the dependence of the entropy of the state variables, the third principle, absolute entropy, maximum working free energy and enthalpy free, bioenergetics, ATP cycle.

Equilibrium conditions, phase equilibria, phase diagrams, Clausius-Clapeyron equation and its solution, the chemical potential, interphase liquid-vapor surface tension, variation of the standard free energy of reaction, chemical equilibrium, fugacity, activity, states reference dependence of the free energy of the state variables, the Gibbs-Helmholtz equation, van't Hoff equation and its solution, functions Giauque, compilations of thermodynamic data, calculate the absolute chemical equilibrium.

Speeds of reaction, order of reaction, mechanism, molecolarita` reactions of zero order, first, second, half-life, radioactive decay, radiocarbon dating, polarimetry, inversion of sucrose, parallel reactions, consecutive, opposite, Arrhenius equation, activation energy, transition state theory, homogeneous catalysis, heterogeneous, enzymatic activity.

Oscillating systems, the Belousov-Zhabotinsky reaction, a model of Lotka-Volterra, deterministic chaos, the butterfly effect, Lyapunov exponents, determinism and irreveribilità.

Disordered systems, elements of fractal geometry, Koch curve, the Cantor dust, Sierpinski carpet, Menger sponge, fractal dimension and its determination, image analysis, computer simulations, random variables, random number generators, Monte methods Carlo, aggregation, percolation, Brownian motion, diffusion in disordered media, notes on the thermodynamics of complex systems, dissipative

Crisis of classical mechanics, black body radiation, photoelectric effect, Compton effect, quantization of energy, spectroscopy and structure of the atom.

UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA BASILICATA  
DIPARTIMENTO DI SCIENZE

---

---

Wave nature of matter, waves, wave functions, Schrodinger equation, exactly solvable quantum problems, free particle, particle in a box, harmonic oscillator, tunnels effect, rigid rotor, hydrogen atom, electron atoms, diatomic and polyatomic molecules , approximation methods.

Elements of relativistic quantum mechanics, Lorentz transformations, four vectors, rule, cone of light, mass and energy, the experimental tests, the Dirac equation, positrons and anti-matter, relativistic effects in chemistry.

---

**Suggested textbooks:**

Peter Atkins, Julio De Paula, Elements of Physical Chemistry,  
Oxford.

---

**Further information:**

---