



SCHEDA DELL'INSEGNAMENTO (SI)

"CHIMICA FISICA ED APPLICAZIONI TERMODINAMICHE"

SSD CHIM/02

DENOMINAZIONE DEL CORSO DI STUDIO: CHIMICA E TECNOLOGIA FARMACEUTICHE

ANNO ACCADEMICO 2021-2022

INFORMAZIONI GENERALI - DOCENTE

DOCENTE: CONCETTA GIANCOLA

TELEFONO: 081674266

EMAIL: GIANCOLA@UNINA.IT

INFORMAZIONI GENERALI - ATTIVITÀ

INSEGNAMENTO INTEGRATO (EVENTUALE):

MODULO (EVENTUALE):

CANALE (EVENTUALE):

ANNO DI CORSO (I, II, III): II

SEMESTRE (I, II): I

CFU: 10

INSEGNAMENTI PROPEDEUTICI (se previsti dall'Ordinamento del CdS)

Matematica, Fisica e Chimica Generale

EVENTUALI PREREQUISITI

Conoscenza di base di calcolo differenziale ed integrale.

OBIETTIVI FORMATIVI

Obiettivo dell'insegnamento è quello di fornire agli studenti e alle studentesse la correlazione, in un contesto unificante, tra gli aspetti microscopici e macroscopici dei differenti approcci e modelli utilizzati dalla chimica fisica, per formulare teorie e principi derivanti dalle leggi che governano i sistemi molecolari in equilibrio e il loro contenuto energetico, con particolare riguardo alla termodinamica delle soluzioni. Ciò consentirà agli studenti e alle studentesse di comprendere come le conoscenze chimico-fisiche siano rilevanti per la ricerca, la produzione e l'impiego dei farmaci. Le conoscenze basilari dei principi della meccanica quantistica e della spettroscopia consentiranno, inoltre, la comprensione del funzionamento delle principali strumentazioni chimico-fisiche comunemente utilizzate nei laboratori.

RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI (DESCRITTORI DI DUBLINO)

Conoscenza e capacità di comprensione

Gli studenti e le studentesse devono dimostrare di conoscere e saper comprendere le nozioni fondamentali della chimica fisica e in particolare della termodinamica classica, dell'elettrochimica, della cinetica e dei principi base della meccanica quantistica e della spettroscopia. Gli studenti e le studentesse devono avere la capacità di illustrare con chiarezza e in forma logica gli argomenti trattati, utilizzando il linguaggio e la terminologia specifici della chimica fisica. Inoltre, devono saper individuare e descrivere le connessioni tra il mondo macroscopico e microscopico e saper cogliere le relazioni che gli argomenti trattati hanno con le discipline tipiche del corso di CTF.

Capacità di applicare conoscenza e comprensione

Gli studenti e le studentesse dovranno acquisire una conoscenza critica dei principi e delle applicazioni della chimica fisica in relazione alle loro applicazioni in campo farmaceutico e tecnologico-farmaceutico. L'impiego di modelli permetterà loro di acquisire una visione critica della conoscenza e la comprensione dei principi atti a gestire, interpretare e spiegare i processi fisici e le trasformazioni chimiche. Gli studenti e le studentesse saranno stimolati a elaborare mappe concettuali che consentiranno di organizzare in maniera logica, concisa e con proprietà di linguaggio i concetti appresi. Ciò permetterà anche una corretta divulgazione della scienza e il rapportarsi sia a persone esperte, che incontreranno nel percorso curriculare e lavorativo, sia a persone meno esperte interessate ad argomenti specifici di cui spesso si discute, quali ad esempio l'entropia e la meccanica quantistica. Inoltre, gli studenti e le studentesse acquisiranno gli strumenti necessari che consentiranno di trasferire le conoscenze ad altri argomenti di insegnamenti del corso di studio, quali ad esempio i meccanismi di reazione affrontati nel corso di chimica organica o altre conoscenze chimico-fisiche inerenti allo studio della tecnologia farmaceutica. Infine, dovranno essere in grado, partendo dalle basi metodologiche acquisite, di affrontare lo studio di argomenti più specialistici e la lettura e la comprensione di testi e articoli della letteratura scientifica pertinenti al settore.

PROGRAMMA-SYLLABUS

Termodinamica. Gas ideali. Leggi dei gas. Equazioni di stato dei gas ideali. Miscele di gas ideali. Gas reali. Interazioni intermolecolari. Fattore di compressibilità. Valori critici. Equazioni di van der Waals e del viriale. Variabili ridotte. Principi di conservazione dell'energia e unità di misura. Definizione di sistema e ambiente. Funzioni di stato e non di stato. Lavoro di espansione di un gas nel vuoto, a pressione costante, a volume costante. Processi reversibili e irreversibili. Calore e temperatura. Equilibrio termico. Flusso di calore. Energia, lavoro e calore. Esperimento di Joule. Energia interna. Prima legge della termodinamica. Calorimetria. Entalpia.

Capacità termiche. Processi adiabatici. Termochimica. Legge di Hess. Legge di Kirchhoff. Processi spontanei: definizioni ed esempi. Spontaneità e disordine. II legge della termodinamica. III legge della termodinamica. Macchine termiche. Disuguaglianza di Clausius. Energia di Gibbs e Helmholtz. Diagrammi di fase di sostanze pure. Equilibri di fase. Equazione di Clapeyron e di Clausius-Clapeyron. Soluzioni di non elettroliti. Definizioni e unità di misura. Grandezze molari e molari parziali. Potenziale chimico. Equazione di Gibbs-Dühem.

Equilibrio chimico. Costanti di equilibrio. Attività e fugacità. Principio di Le Chatelier. Equazione di van 't Hoff. Soluzioni ideali e non ideali. Pressioni di vapore e volatilità. Legge di Raoult. Soluzioni ideali diluite. Legge di Henry. La termodinamica del mescolamento. Il potenziale chimico in soluzione. Le miscele binarie dei liquidi volatili. Le soluzioni reali. Gli equilibri di fase per i sistemi a due componenti. I diagrammi pressione-composizione. Regola delle fasi. I diagrammi temperatura-composizione. Gli azeotropi. Il diagramma di stato liquido-solido. Le proprietà colligative. L'attività del soluto e del solvente.

Elettrochimica. Soluzioni di elettroliti. Deviazione dall'idealità. Conduttività. Celle elettrochimiche: reazioni di ossido-riduzione ed elettrodi. Reazioni agli elettrodi. Tipi di celle. La reazione di cella e la forza elettromotrice. Le celle all'equilibrio. Potenziali standard. Elettrodi di uso comune. La determinazione del pH. La serie elettrochimica. Relazione tra la forza elettromotrice e le funzioni termodinamiche.

Cinetica chimica. Definizione della velocità di reazione. Ordine di reazione. Leggi cinetiche e costanti cinetiche. Le reazioni di ordine 0, 1 e 2. Tempo di dimezzamento. Moleolarità di una reazione. Le reazioni elementari. Le reazioni unimolecolari: il meccanismo di Lindemann. Le reazioni più complesse: reazioni che tendono all'equilibrio, reazioni consecutive e reazioni a catena. L'approssimazione dello stato stazionario. La dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura. La legge di Arrhenius.

Quantomeccanica. La teoria quantistica. Moti periodici e propagazione di onde sinusoidali. I fallimenti della fisica classica: la radiazione del corpo nero, le capacità termiche, l'effetto fotoelettrico, la diffrazione degli elettroni, spettri atomici e molecolari. La funzione d'onda. L'equazione di Schrödinger. La densità di probabilità. Il principio di indeterminazione. Applicazioni della meccanica quantistica: moto traslazionale di una particella in una scatola, effetto tunnel. Moto vibrazionale: l'oscillatore armonico. Moto rotazionale.

Spettroscopia. Interazione della radiazione con la materia. Stato fondamentale e stati eccitati. Spettroscopia di assorbimento e di emissione. Processi di assorbimento, emissione e dispersione. Lo spettro e le bande spettrali. Schema a blocchi di uno spettrofotometro. Fattori che determinano l'ampiezza della linea. Risoluzione spettrale e intensità di banda. Transizioni rotazionali, vibrazionali, elettroniche. Usi della spettroscopia. Spettrofotometria UV/visibile. Legge di Lambert-Beer. Sorgenti e rivelatori. Applicazioni della spettroscopia UV nell'analisi farmaceutica.

MATERIALE DIDATTICO

Peter W. Atkins, Julio De Palma, Chimica Fisica, Zanichelli

Le slides delle lezioni sono a disposizione sul sito per gli studenti iscritti al corso.

MODALITÀ DI SVOLGIMENTO DELL'INSEGNAMENTO

Il corso prevede lezioni frontali (6 ore a settimana) ed esercitazioni in aula per approfondire argomenti specifici (1 ora a settimana)

VERIFICA DI APPRENDIMENTO E CRITERI DI VALUTAZIONE

a) Modalità di esame:

L'esame si articola in prova	
scritta e orale	
solo scritta	
solo orale	X
discussione di elaborato progettuale	
altro	