

Chimica Fisica

Laurea Triennale

Biologia molecolare



Introduzione

Dr. Laura Orian

Dipartimento di Scienze chimiche

Università degli Studi di Padova

Via Marzolo 1 35129 Padova

Tel. 0498275140

E-mail laura.orian@unipd.it



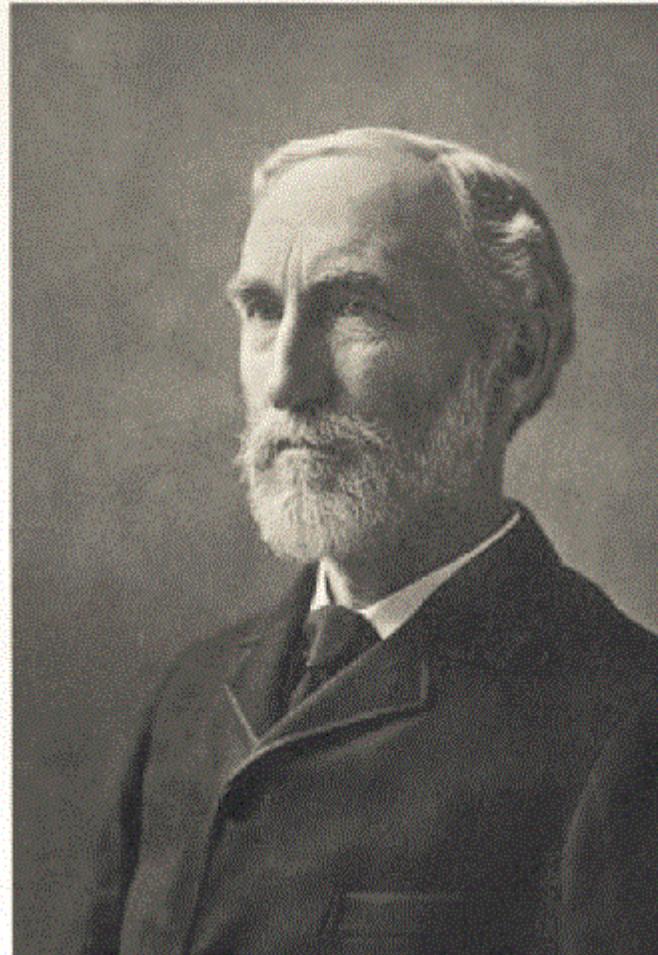
Cos'è la chimica fisica?

La **chimica fisica** è la branca della **chimica** che più si avvicina alla **fisica**, adottandone il rigore metodologico sia a livello sperimentale che teorico e adoperando un significativo formalismo **matematico**, nel tentativo di descrivere nella maniera più accurata possibile i fenomeni fondamentali che stanno alla base dei sistemi chimici.

Fondatore della moderna chimica fisica viene considerato il chimico statunitense **Willard Gibbs**, che con la sua pubblicazione "*On the Equilibrium of Heterogeneous Substances*" (*Sull'equilibrio delle sostanze eterogenee*) del **1876** introdusse alcuni concetti quali quelli di **energia libera**, **potenziale chimico** e **regola delle fasi** che risulteranno tra i principali fondamenti di questa disciplina.

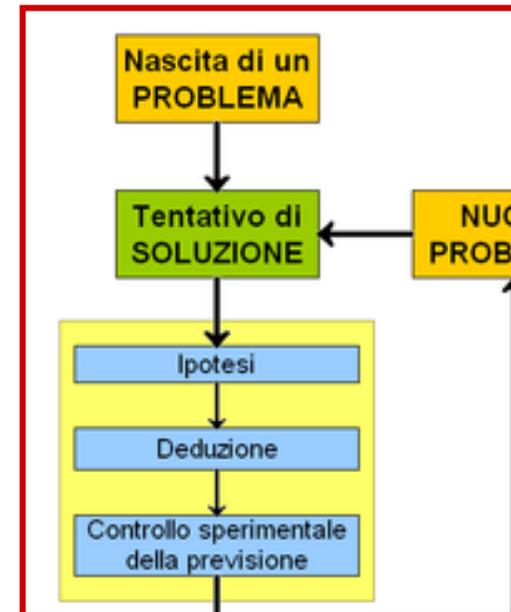
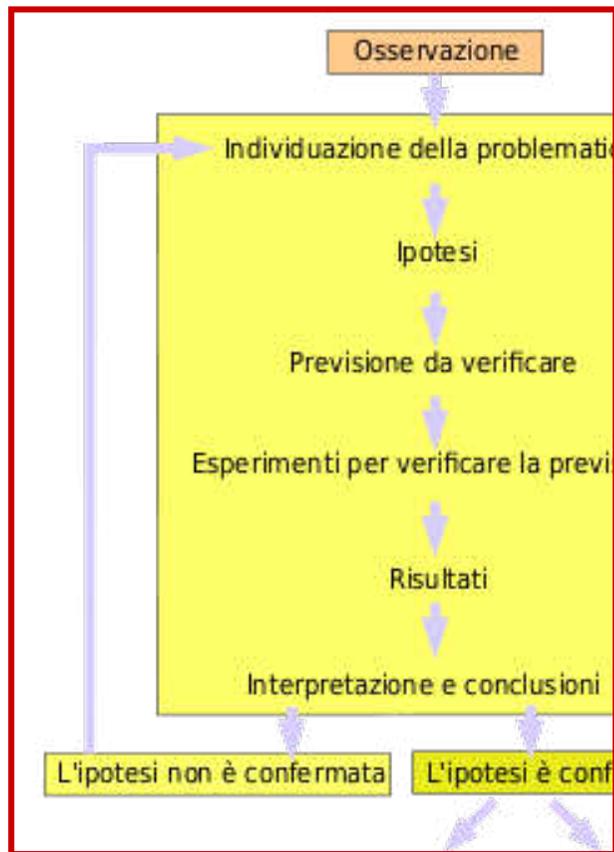
Principali aree di interesse della chimica fisica

- Meccanica quantistica e chimica quantistica
- Chimica computazionale
- **Termodinamica e termochimica**
- Meccanica statistica
- **Cinetica chimica**
- Dinamica molecolare
- **Elettrochimica**
- **Spettroscopia molecolare**
- Fenomeni di trasporto
- Chimica dello stato solido e delle superfici
- Chimica delle interfasi
- Chimica dei colloidi
- Fotochimica
- Femtochimica
- Chimica supramolecolare
- Chimica nucleare
- Sonochimica
- Astrochimica
- Strutturistica chimica
- **Transizioni di fase**
- Magnetochimica



Metodo sperimentale

Metodo induttivo e metodo deduttivo



Termodinamica

- La **termodinamica** è quella branca della **fisica** e della **chimica** (**chimica fisica**) che descrive le trasformazioni subite da un **sistema** in seguito a processi che coinvolgono la trasformazione di **materia** ed **energia**.
- La termodinamica classica si basa sul concetto di sistema macroscopico, ovvero una porzione di materia fisicamente o concettualmente separata dall'ambiente esterno, che spesso per comodità si assume non perturbato dallo scambio di energia con il sistema. Lo **stato** di un sistema macroscopico che si trova all'equilibrio è specificato da grandezze dette variabili termodinamiche o di stato come la **temperatura**, la **pressione**, il **volume**, la **composizione chimica**.

Definizione macroscopica di materia

In **fisica classica**, con **materia** genericamente si indica qualsiasi cosa che abbia **massa** e occupi **spazio** o alternativamente la sostanza di cui gli oggetti fisici sono composti, escludendo l'**energia** dovuta al contributo dei **campi** delle forze.

Il vocabolo *materia* deriva dal latino *mater* (madre), il che indica come la materia veniva considerata il fondamento costituente, la madre, di tutti i corpi e di tutte le cose.

Nella **fisica classica** l'**energia** è definita come la capacità di un **corpo** o di un **sistema** di compiere **lavoro** e la **misura** di questo lavoro è a sua volta la misura dell'energia.

In questo senso l'energia può essere definita come una grandezza fisica posseduta dal sistema che può venire "consumata" per generare una forza. Dal momento che l'energia posseduta da un sistema può essere utilizzata dal sistema stesso per produrre più tipi di forze, si definisce una seconda grandezza, il **lavoro** appunto, che definisce il consumo di energia in relazione al processo fisico mediante il quale la forza è stata generata.

Unità di misura dell'energia

<i>Nome</i>	<i>Simbolo</i>	<i>Fattori di conversione</i>
Joule	J	$1 \text{ J} = 1 \text{ Newton} \cdot 1 \text{ m} = \text{Kg m}^2 \text{ s}^{-2}$
Erg	erg	$1 \text{ J} = 10^7 \text{ erg}$
Caloria	cal	$1 \text{ cal} = 4,184 \text{ J}$
Litro · atmosfera	L atm	$1 \text{ L atm} = 101.325 \text{ J}$
Elettron-volt	eV	$1 \text{ eV} = 1.60219 \times 10^{-19} \text{ J} = 96.485 \text{ kJ mol}^{-1}$

Il sistema

Un sistema si definisce come una porzione *limitata* di materia dell'universo. Si distinguono:

sistemi isolati / niente scambio di energia e materia

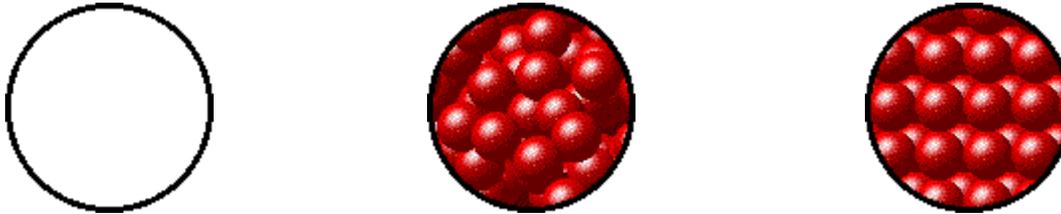
sistemi chiusi / niente scambio di materia

sistemi aperti

Sulla base dello scambio di calore si definiscono sistemi **adiabatici**, se non consentono lo scambio di calore; **diatermici**, se invece lo consentono.

Una **fase** è costituita da una porzione del sistema omogenea fisicamente (temperatura, pressione, stato di aggregazione, ecc.) e chimicamente (composizione), separata da eventuali altre fasi del sistema da una superficie definita.

Stati della materia



Le particelle in un:

gas sono ben distanziate e non hanno una disposizione regolare.

liquido sono vicine tra loro e non hanno una disposizione regolare.

solido sono impaccate, di solito in modo regolare.

Le particelle in un:

gas vibrano e si muovono rapidamente ad alta velocità.

liquido vibrano, si muovono e scorrono l'una vicino all'altra.

solido vibrano ma in genere non si spostano.

Stati della materia

Gas	Liquido	Solido
Assume la forma e il volume del suo contenitore e le particelle si muovono liberamente	Assume la forma e il volume del suo contenitore e le particelle si muovono e scorrono le une accanto alle altre	Ha un volume proprio e una forma rigida; le particelle stanno nel loro posto
Comprimibile, c'è un sacco di spazio tra le particelle	Non facilmente comprimibile, c'è poco spazio tra le particelle	Non facilmente comprimibile, c'è poco spazio tra le particelle
Fluisce facilmente, le particelle si muovono liberamente	Fluisce facilmente, le particelle si muovono e scorrono le une accanto alle altre	Non fluisce facilmente, le particelle non possono muoversi nè scorrere le une accanto alle altre

Alcune definizioni dalla fisica

La **forza** è una grandezza fisica vettoriale che si manifesta modificando lo stato di moto di un corpo. La massa m soggetta a forza \vec{F} subisce una accelerazione \vec{a} (variazione di velocità) :

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a}$$

L'unità di misura è il Newton:
 $1\text{N} = 1\text{Kg m s}^{-2}$

Alcune definizioni dalla fisica

Il **lavoro** è una grandezza fisica descritta dal prodotto scalare di una forza \vec{F} che agisce su una massa, per lo spostamento \vec{d} della massa stessa.

$$W = \vec{F} \cdot \vec{d}$$

L'unità di misura è il Joule:

$$1\text{J} = 1\text{Kg m}^2 \text{s}^{-2}$$

La pressione

La **pressione** è il rapporto tra la forza F e l'area A sulla quale la forze viene esercitata

$$P = F/A$$

L'unità di misura SI della pressione è il Pascal: $1\text{Pa} = 1\text{Kg m}^{-1}\text{s}^{-2}$

Nome	Simbolo	Valore
pascal	Pa	$1\text{ N m}^{-2} = 1\text{ kg m}^{-1}\text{ s}^{-2}$
bar	bar	10^5 Pa
atmosfera	atm	$1.01325 \times 10^5\text{ Pa}$
torr	Torr	$1/760\text{ atm} = 133.322\text{ Pa}$
millimetro di Hg	mmHg	$1\text{ Torr} = 133.322\text{ Pa}$

La temperatura



La **temperatura** è la proprietà di un oggetto che determina in quale verso fluirà l'energia se l'oggetto stesso viene posto a contatto con un altro: l'energia fluisce dalle regioni a temperatura più alta verso quelle a temperatura più bassa.

Due corpi alla stessa temperatura sono all'**equilibrio termico**.

La temperatura si misura in gradi Celsius o centigradi.

Sulla **scala Celsius** il punto di congelamento dell'acqua a 1 atm corrisponde a 0 e il punto di ebollizione a 100.

Nelle applicazioni scientifiche viene utilizzata la **scala Kelvin**.

Le due scale sono correlate da

$$T(\text{K}) = \theta(^{\circ}\text{C}) + 273.15$$

Ad esempio a 1 atm l'acqua congela a 273 K e bolle a 373 K.

Il valore $T=0$ prende il nome di **zero assoluto**.

Principio zero della termodinamica

Il principio zero della termodinamica
postula che: *se i corpi A e B sono
entrambi in equilibrio termico con un terzo
corpo C, allora lo sono anche fra loro.*

Se $T_A = T_C$ e $T_B = T_C$,
allora $T_A = T_B$

Equazione di stato

Lo stato di un campione materiale si può specificare indicando il valore delle seguenti proprietà:

V volume

P pressione

T temperatura

N quantità di sostanza

Le variabili di stato non sono indipendenti.

Proprietà estensive e intensive

Lo **stato termodinamico** di un sistema viene rappresentato tramite variabili chimico-fisiche misurabili, dette **variabili di stato**.

Si distinguono:

1) proprietà **estensive**: dipendenti dall'estensione del sistema

(proporzionali alla quantità di materia).

Esempi: massa m , volume V , numero di moli dei componenti...

2) proprietà **intensive**: indipendenti dall'estensione del sistema

Esempi: densità $\rho = m/V$, pressione P , temperatura assoluta T ...

Equilibrio termodinamico

Equilibrio termodinamico: Un sistema in equilibrio termodinamico soddisfa alle seguenti condizioni:

- **Equilibrio meccanico.** La forza che il sistema esercita è uniforme in tutti i punti del sistema ed è equilibrata da forze esterne.
- **Equilibrio termico.** La temperatura è uniforme in tutti i punti del sistema ed è uguale a quella dell'ambiente circostante.
- **Equilibrio chimico.** La struttura interna e la composizione chimica rimangono costanti.

Equazioni di stato

Una sostanza obbedisce a un'equazione di stato della forma: $P=f(n,V,T)$

Un'equazione di stato nota e semplice è quella dei gas a bassa pressione:

$$PV = nRT$$