

## כימיה פיסיקלית א 1 – 2211-1-204

ספר הקורס: P.W Atkins, Physical Chemistry, 8<sup>th</sup> edition.

5 שעות הרצאה, 2 שעות תרגול, סה"כ 6 נק"ז.

קביעת ציון: 2 בחני אמצע שמשקל כל אחד מהם 15% (תקף). ציון סופי במשקל 70%.

### סילבוס:

תרמודינמיקה: מערכות תרמודינמיות – משוואות ומשתני מצב. גדלים פיזיקליים רלוונטיים לכימיה פיזיקלית. גז ריאלי וכוחות בינמולקולריים. החוק הראשון של התרמודינמיקה, אנרגיה פנימית ואנתלפיה. קיבול חום ותרמוכימיה. החוק השני של התרמודינמיקה. תהליכים הפיכים ובלתי הפיכים, עבודה מקסימלית והגדרת האנרגיה החופשית של גיבס – פוטנציאל כימי, אקטיביות, קשר לקבוע שיווי המשקל. דיאגרמת פאזות – חוק הפאזות של גיבס, משוואת קלפרון, משוואת קלאוזיוס-קלפרון. תמיסות אידיאליות וריאליות. זיקוק. קינטיקה: אספקטים אמפיריים: הגדרת מהירות תגובה, משוואות קצב וסדרן, קבוע המהירות, שיטות ניסיוניות לקביעת סדר התגובה וקבועי הקצב. אינטגרציה של חוק הקצב, קביעת סדר וקבוע התגובה, זמן מחצית חיים. מנגנוני תגובה בסיסיים, מולקולריות, הנחת מצב עמיד, שלב קובע מהירות. מנגנון לינדמן-הינשלוד ומנגנון מיכאליס-מנטן. תלות קבוע הקצב בטמפרטורה. שיווי משקל בהסתכלות קינטי. מולקולות על משטחים (ספיחה, קטליזה הטרוגנית).

**Thermodynamics:** Definitions. Real gases: Intermolecular forces, equations of state, critical parameters, law of corresponding states. First Law:  $PV$  work, enthalpy, processes on ideal gases (closed system), thermodynamic cycles, Joule-Thomson coefficient. Thermochemistry: bond enthalpy, phase-transition enthalpy, Born-Haber cycle and Hess' law, enthalpy of formation, enthalpy of reaction, enthalpy of state transition, Kirchhoff's law ( $\Delta C_p$ ). Second Law: a reversible process, entropy, reversible vs irreversible cycle, definitions of entropy (Clausius, Kelvin, Carnot), Carnot's cycle and efficiency, third law and  $S_{T=0}$ . Refrigeration. Free energy: Helmholtz ( $A$ ), Gibbs ( $G$ ), spontaneous process, chemical potential, Van't Hoff equation, Gibbs-Helmholtz equation, equilibrium constant. Phase diagrams: vapor pressure, Clayperon equation, Clausius-Clayperon equation,  $\mu=f(T)$ . Multicomponent solutions - Raoult's law, Henry's law, distillation. **Kinetics:** Definitions and basics: extent of reaction ( $\xi$ ), reaction rate ( $r$  or  $v$ ), experimental differential rate law, half life, integrated rate laws, solving multiple reactions using the ( $\xi$ ) definition, gas-phase reactions, Experimental techniques such as UV-vis (Beer-Lambert). Experimental determination of rate laws: pseudo-order, initial rates method, half-life of reaction. Basic mechanisms: elementary reaction, molecularity, consecutive reactions, parallel reaction, reversible reactions. Arrhenius model, reaction profile, collision theory, Eyring model. Principles to solve the mechanism: detailed balance (applies to equilibrium), rate determining step, steady state approximation, pre-equilibrium condition. Complex mechanisms: Lindemann-Hinshelwood for unimolecular gas reactions, Michaelis-Menten

enzymatic reactions.