

Libri di testo consigliati

In Italiano:

D.F. Shriver & P.W. Atkins

Chimica Inorganica

(II edizione, dalla V edizione Inglese)

Zanichelli

G. L. Miessler, D. A. Tarr

Chimica Inorganica

Piccin Editore

In Inglese:

C.E. Housecroft, A.G. Sharpe

Inorganic Chemistry (3rd edition)

Pearson

D.F. Shriver & P.W. Atkins

Inorganic Chemistry (4th or 5th edition)

Oxford

In the last 5 years, the average American (and likely European) has relied on **80** elements for quality of life.

General Electric uses **72** of the first **82** elements in its product line.



Pharmaceuticals

Pd, Rh, Os, Ir



Household Items

Rh, Pt



Refining

La, Pt



Hybrid/Electric Cars

Nd, Tb, Dy, Pr



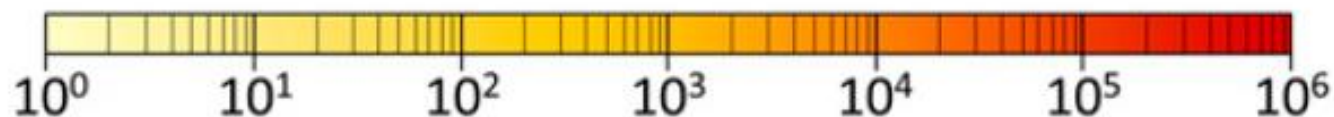
Alternative Energy

Ru, Nd, Tb, Dy, Pr

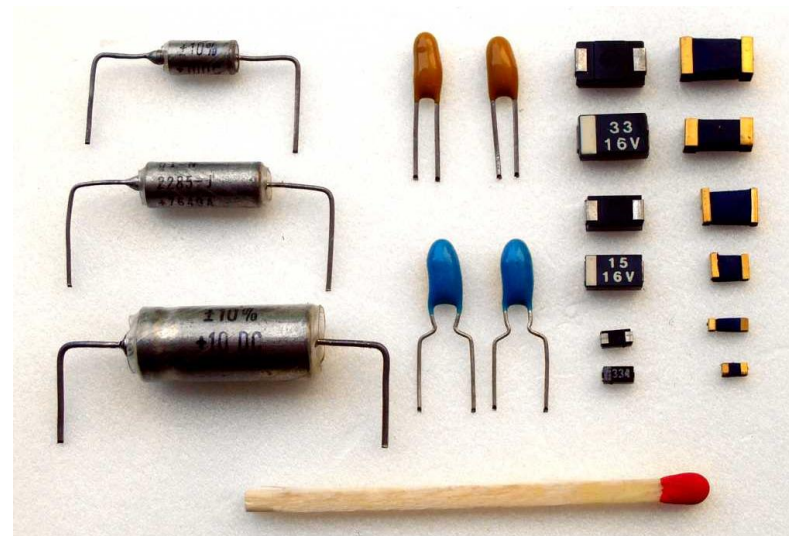
Concentrazione (in ppm) dei 44 elementi che si trovano in un comune circuito elettronico stampato

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uu	Fl	Uu	Lv	Uus	Uuo

* Lanthanides	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
** Actinides	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr



Columbite – Tantalite = **Coltan**
 $(\text{Fe}, \text{Mn})(\text{Nb}_n, \text{Ta}_m)_2\text{O}_6$



..ogni studente in chimica, davanti ad un qualsiasi trattato, dovrebbe essere consapevole che in una di quelle pagine, forse in una sola riga, o formula, o parola, sta scritto il suo avvenire, in caratteri indecifrabili, ma che diverranno chiari «poi»: dopo il successo o l'errore o la colpa, la vittoria o la disfatta.

...quale chimico, davanti alla tabella del Sistema Periodico....non vi ravvisa sparsi i tristi brandelli, o trofei, del proprio passato professionale?

Così avviene dunque, che ogni elemento dica qualcosa a qualcuno (a ciascuno una cosa diversa), come le valli o spiagge visitate in giovinezza...

Primo Levi Il Sistema Periodico

	Proton	Electron	Neutron
Charge / C	$+1.602 \times 10^{-19}$	-1.602×10^{-19}	0
Charge number (relative charge)	1	-1	0
Rest mass / kg	1.673×10^{-27}	9.109×10^{-31}	1.675×10^{-27}
Relative mass	1837	1	1839

$h =$ costante di Planck $= 6.626 \times 10^{-34}$ J·s

$\hbar = h/2\pi = 1.052 \times 10^{-34}$ J·s

$a_0 =$ raggio di Bohr $= 5.293 \times 10^{-11}$ m $= 52.93$ pm $= 0.529$ Å

(1 pm $= 10^{-12}$ m; 1 Å $= 10^{-10}$ m, cioè 1 Å $= 100$ pm;

1 nm $= 1000$ pm, 1 nm $= 10$ Å)

Raggio del protone: ca. 1 fm (1 fm $= 10^{-15}$ m)

Raggio di un nucleo atomico: ca. 10 fm

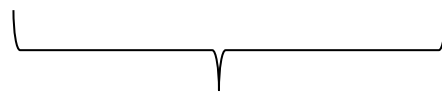
Nell'atomo di H, rapporto raggio atomo/raggio nucleo $=$ ca. 50.000

...se il protone dell'atomo di idrogeno avesse raggio 1m e fosse posto in Piazza Unità, l'elettrone starebbe – mediamente – a più di 50 km di distanza, cioè quasi a Palmanova del Friuli..

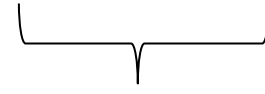
equazione di Schrödinger

(caso monodimensionale)

$$-\hbar^2/2m \times d^2\Psi/dx^2 + V\Psi = E\Psi$$



cinetica



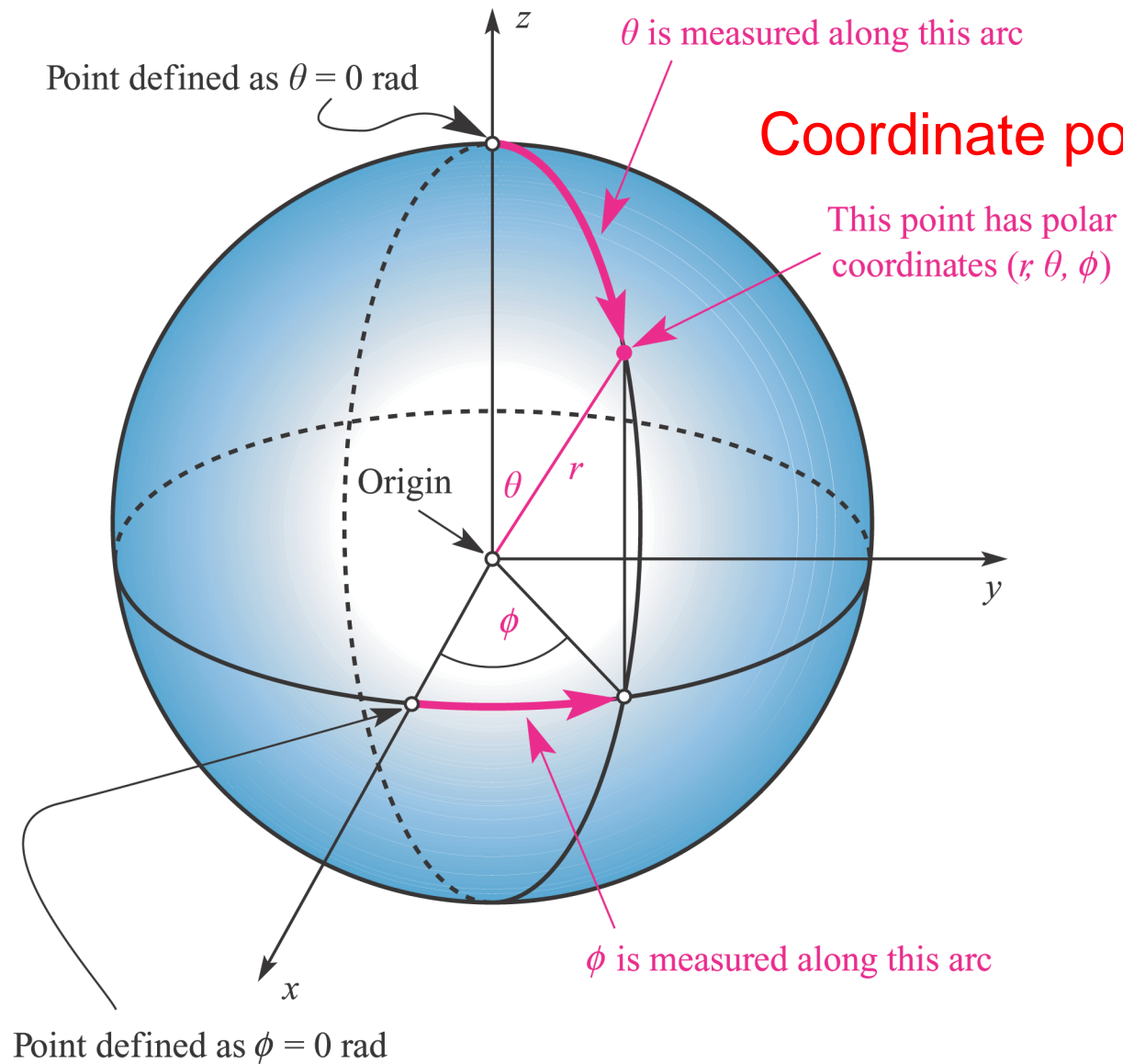
potenziale

Ψ = funzione d'onda

$$d^2\Psi/dx^2 + 8\pi^2m/h^2 \cdot (E - V) \Psi = 0$$

Le funzioni d'onda Ψ per un elettrone sono soluzioni dell'**equazione di Schrödinger** e descrivono il comportamento dell'elettrone (inteso come onda) in una regione di spazio chiamata **orbitale**.

Alle funzioni d'onda Ψ sono associati valori quantizzati di energia



Coordinate polari sferiche

$$\Psi(x, y, z) = R_{n,l}(r) \cdot A_{l,m}(\theta, \phi)$$

Ogni **orbitale atomico**, descritto da una Ψ , è definito univocamente da un set di 3 numeri interi, i numeri quantici, n , l ed m_l

$n =$ **numero quantico principale** ($n \geq 1$): energia, grandezza

$l =$ **numero quantico (del momento angolare) orbitale**: forma

$l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots, n-1$ (in totale n valori interi)

La grandezza del momento angolare orbitale è data da $\frac{h}{2\pi} \times \sqrt{l(l+1)}$

$m_l =$ **numero quantico magnetico**: orientazione

$m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ (in totale $2l+1$ valori interi)

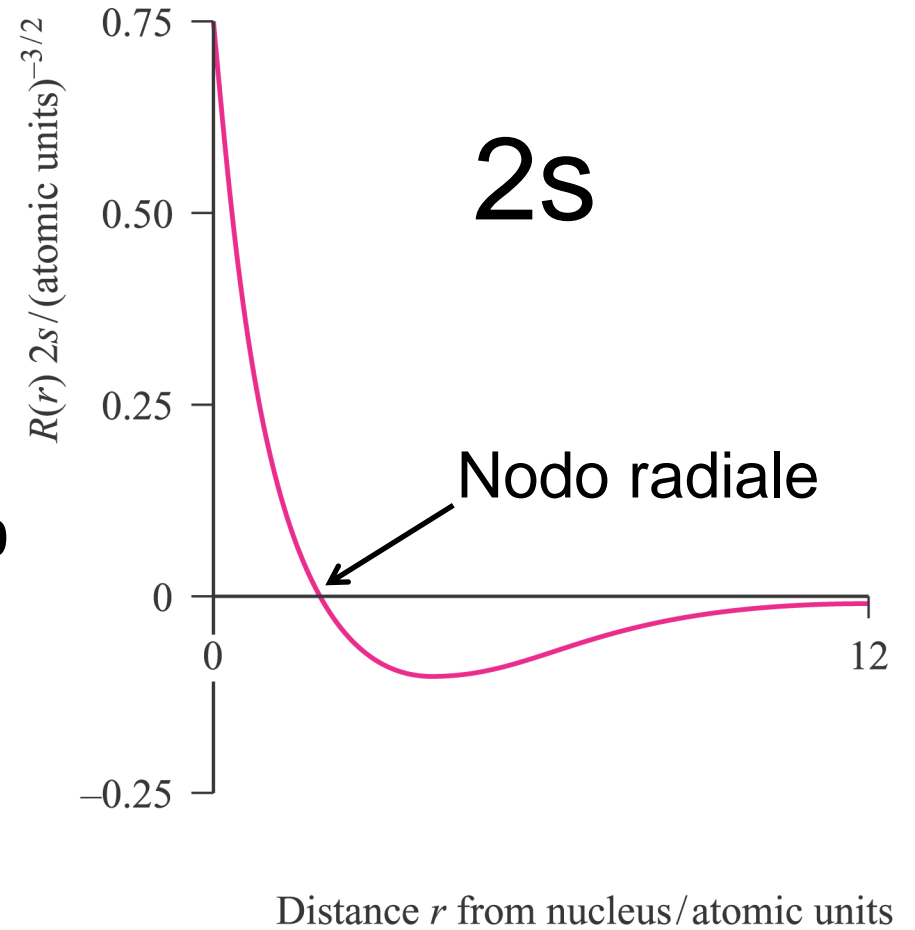
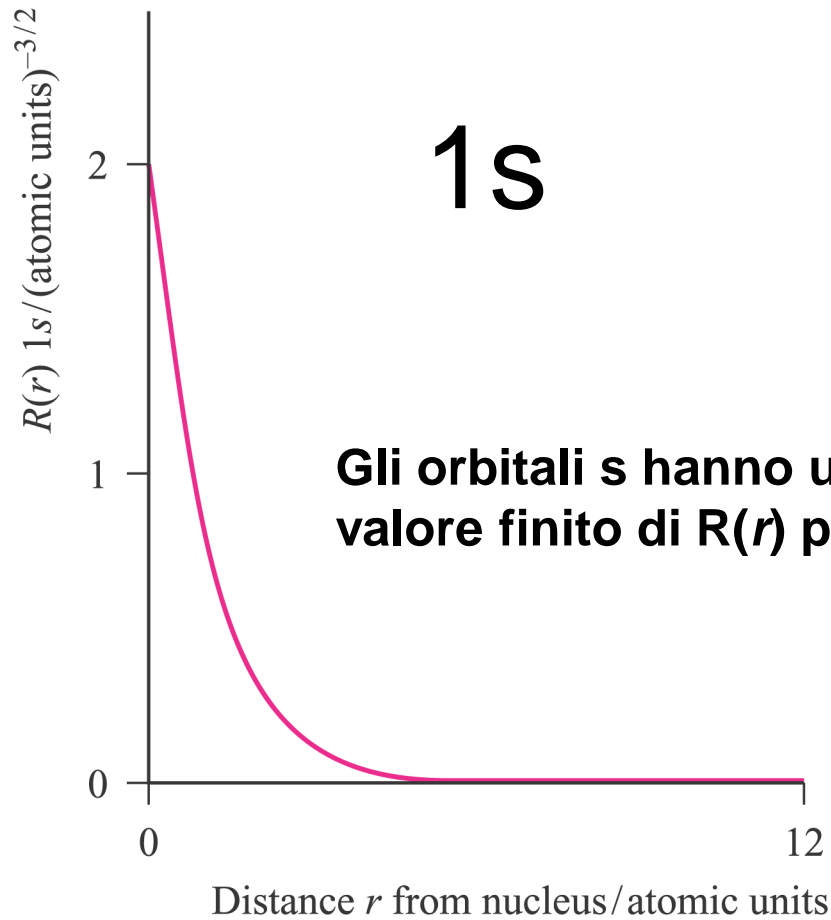
Il numero quantico m_l specifica la componente (proiezione) del momento angolare orbitale lungo un asse arbitrario (tipicamente z) che passa per il nucleo

Funzioni d'onda per l'atomo H

Atomic orbital	n	l	m_l	Radial part of the wavefunction, $R(r)^\dagger$	Angular part of wavefunction, $A(\theta, \phi)$
1s	1	0	0	$2e^{-r}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
2s	2	0	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}(2-r)e^{-r/2}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
$2p_x$	2	1	+1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}r e^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\sin \theta \cos \phi)}{2\sqrt{\pi}}$
$2p_z$	2	1	0	$\frac{1}{2\sqrt{6}}r e^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\cos \theta)}{2\sqrt{\pi}}$
$2p_y$	2	1	-1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}r e^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\sin \theta \sin \phi)}{2\sqrt{\pi}}$

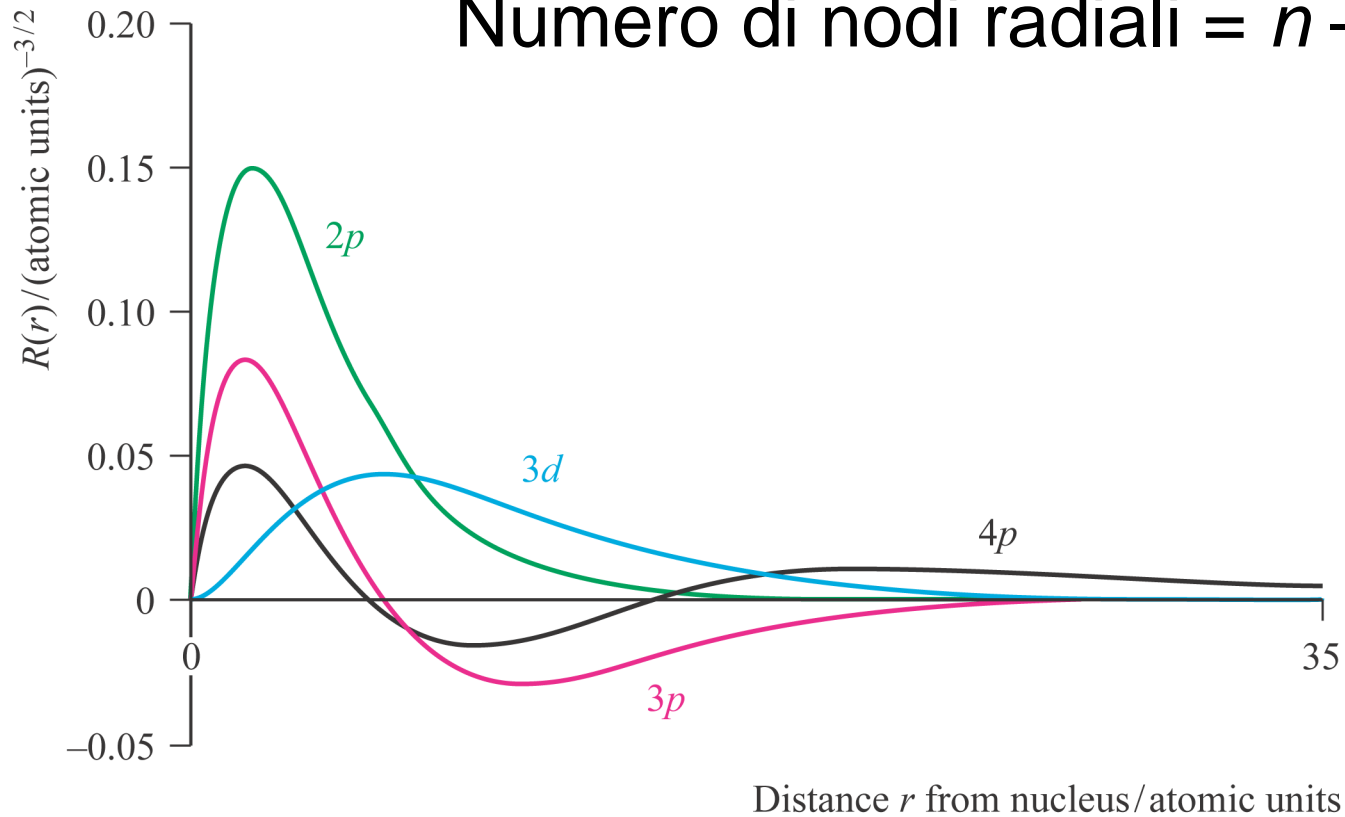
[†] For the 1s atomic orbital, the formula for $R(r)$ is actually $2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$ but for the hydrogen atom, $Z = 1$ and $a_0 = 1$ atomic unit. Other functions are similarly simplified.

$$\Psi(x, y, z) = R_{n,l}(r) \cdot A_{l,m}(\theta, \phi)$$



Componente radiale della funzione d'onda

Numero di nodi radiali = $n - l - 1$




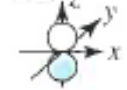


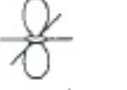




Componente radiale della funzione d'onda

$$\Psi(x, y, z) = R_{n,l}(r) \cdot A_{l,m}(\theta, \phi)$$

Atomic orbital	n	l	m_l	Radial part of the wavefunction, $R(r)^\dagger$	Angular part of wavefunction, $A(\theta, \phi)$
1s	1	0	0	$2e^{-r}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
2s	2	0	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}(2-r)e^{-r/2}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
2p _x	2	1	+1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}re^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\sin\theta\cos\phi)}{2\sqrt{\pi}}$
2p _z	2	1	0	$\frac{1}{2\sqrt{6}}re^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\cos\theta)}{2\sqrt{\pi}}$
2p _y	2	1	-1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}re^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\sin\theta\sin\phi)}{2\sqrt{\pi}}$

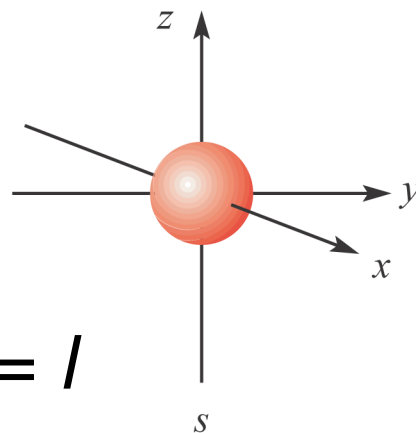
[†] For the 1s atomic orbital, the formula for $R(r)$ is actually $2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$ but for the hydrogen atom, $Z = 1$ and $a_0 = 1$ atomic unit. Other functions are similarly simplified.

TABELLA 2.3 Funzioni d'onda dell'atomo di idrogeno: funzioni angolari

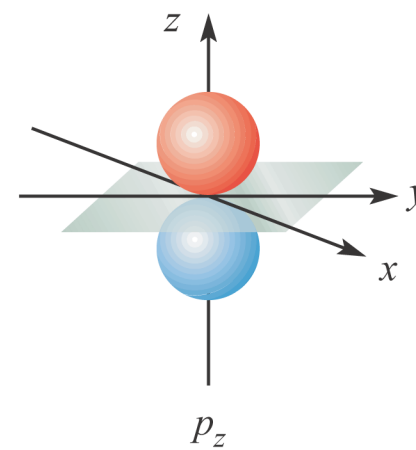
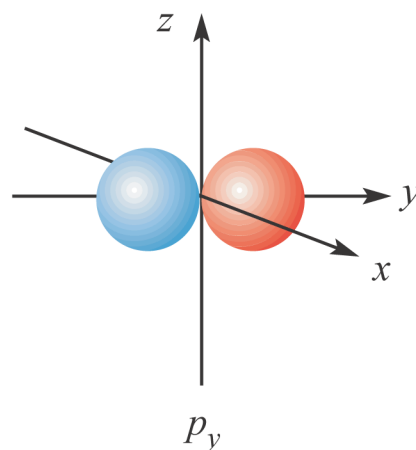
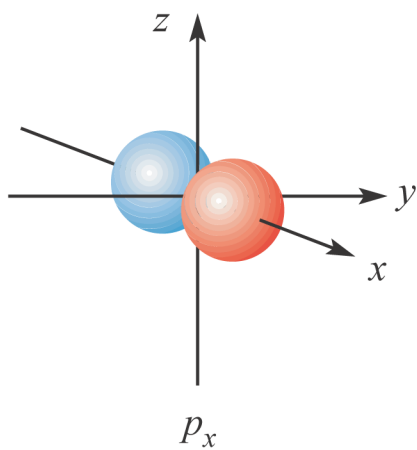
Fattori angolari				Funzioni d'onda reali			
l	Legate al momento angolare		Funzioni di θ	In coordinate polari	In coordinate cartesiane	Forme	Nome
	m_l	Φ					
0(s)	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$		s
1(p)	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2} \cos \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \cos \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{z}{r}$		p_z
	+1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \cos \phi$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{x}{r}$		p_x
	-1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \sin \phi$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{y}{r}$		p_y
2(d)	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$\frac{1}{4\sqrt{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$\frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{(2z^2 - x^2 - y^2)}{r^2}$		d_{z^2}
	+1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{2} \cos \theta \sin \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \cos \theta \sin \theta \cos \phi$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{xz}{r^2}$		d_{xz}
	-1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{2} \cos \theta \sin \theta$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \cos \theta \sin \theta \sin \phi$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{yz}{r^2}$		d_{yz}
	+2	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{2i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{4} \sin^2 \theta$	$\frac{1}{4\sqrt{\pi}} \sin^2 \theta \cos 2\phi$	$\frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{(x^2 - y^2)}{r^2}$		$d_{x^2-y^2}$
	-2	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-2i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{4} \sin^2 \theta$	$\frac{1}{4\sqrt{\pi}} \sin^2 \theta \sin 2\phi$	$\frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{xy}{r^2}$		d_{xy}

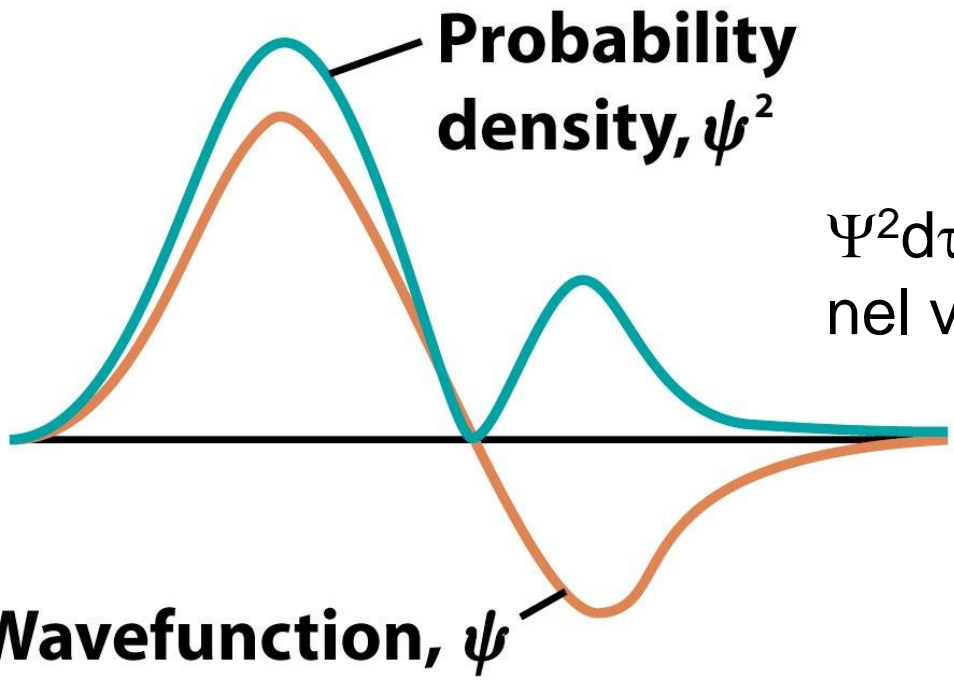
Le combinazioni di solito scelte per gli orbitali p sono la somma e la differenza dei cosiddetti fattori angolari p con $m_l = +1$ e -1 , normalizzate e quindi moltiplicate rispettivamente per le costanti $1/\sqrt{2}$ e $i/\sqrt{2}$.

Superfici di confine senza significato fisico, $A(\theta, \phi)$



Numero di piani nodali = l





$\Psi^2 d\tau$ = probabilità di trovare l'elettrone nel volume infinitesimo $d\tau$

$$\int \Psi^2 d\tau = 1$$



Probability density

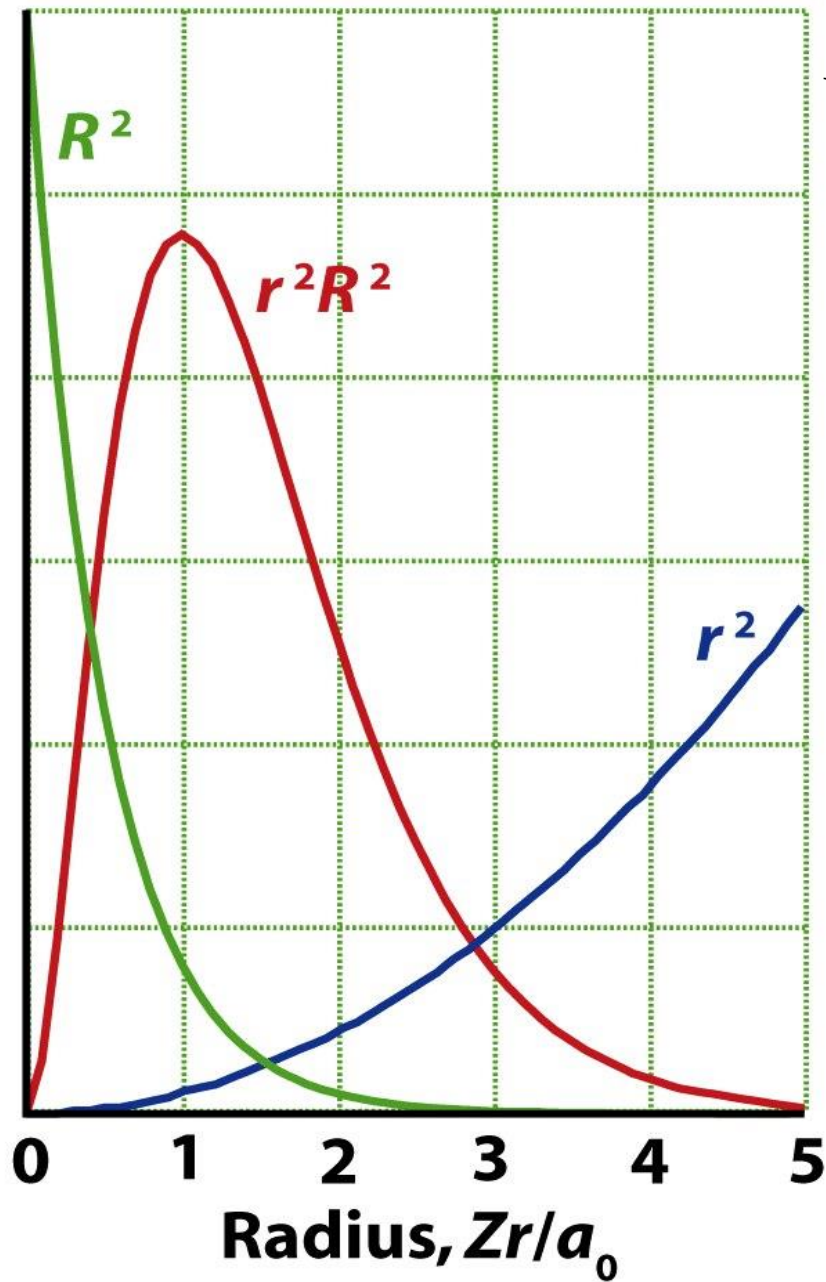
$$\Psi^2(x, y, z) = R_{n,l}(r)^2 \cdot A_{l,m}(\theta, \phi)^2$$

$$\Psi^2(x, y, z) = R_{n,l}(r)^2 \cdot A_{l,m}(\theta, \phi)^2$$

funzione di distribuzione radiale

$$P(r) = 4\pi r^2 R(r)^2$$

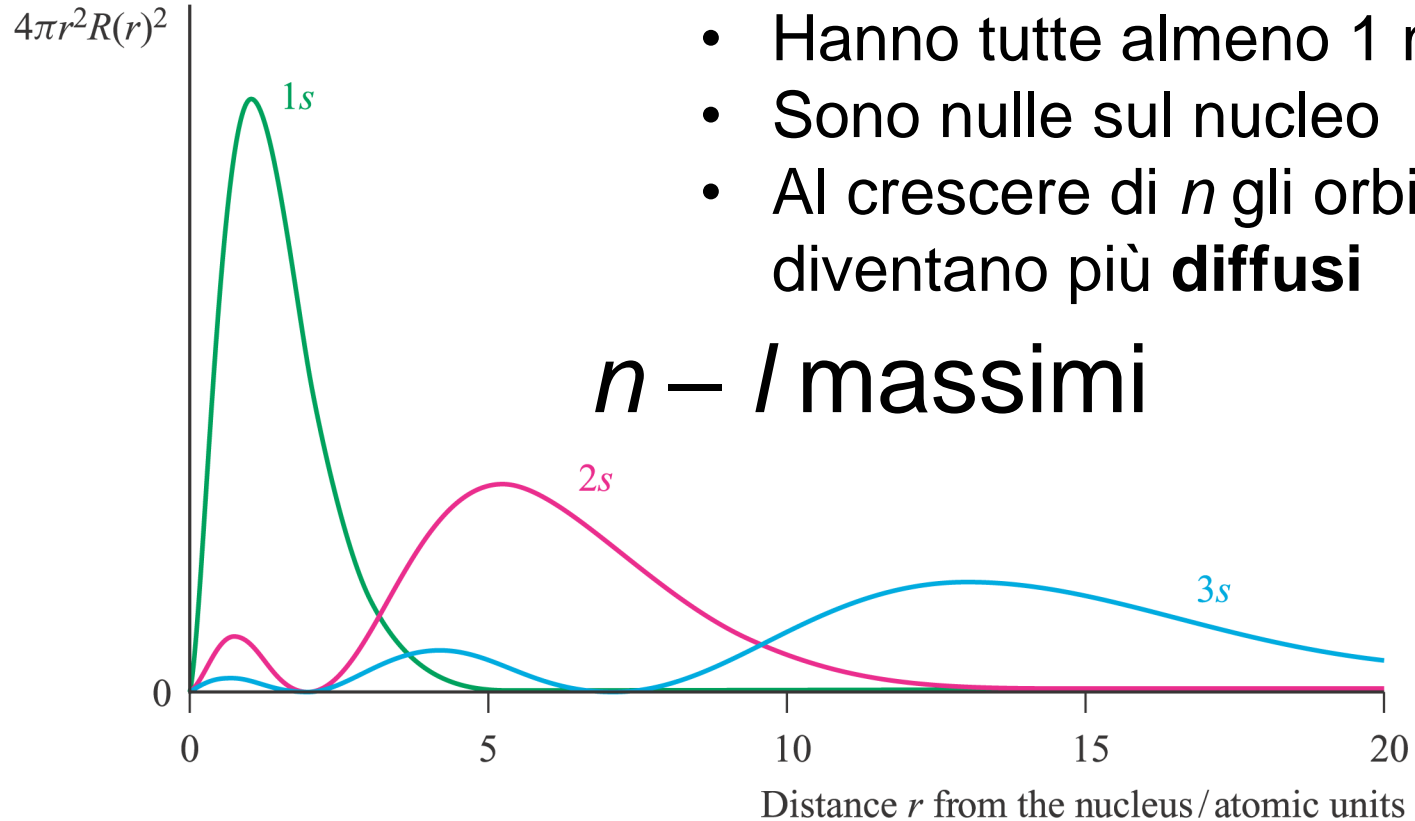
probabilità di trovare l'elettrone a una distanza r dal nucleo (in un guscio sferico di superficie $4\pi r^2$ e di spessore dr), indipendentemente dalla direzione. È l'integrale di $\Psi^2 dr$ esteso su tutti gli angoli



Orbitale 1s

$$P(r) = 4\pi r^2 \Psi^2$$

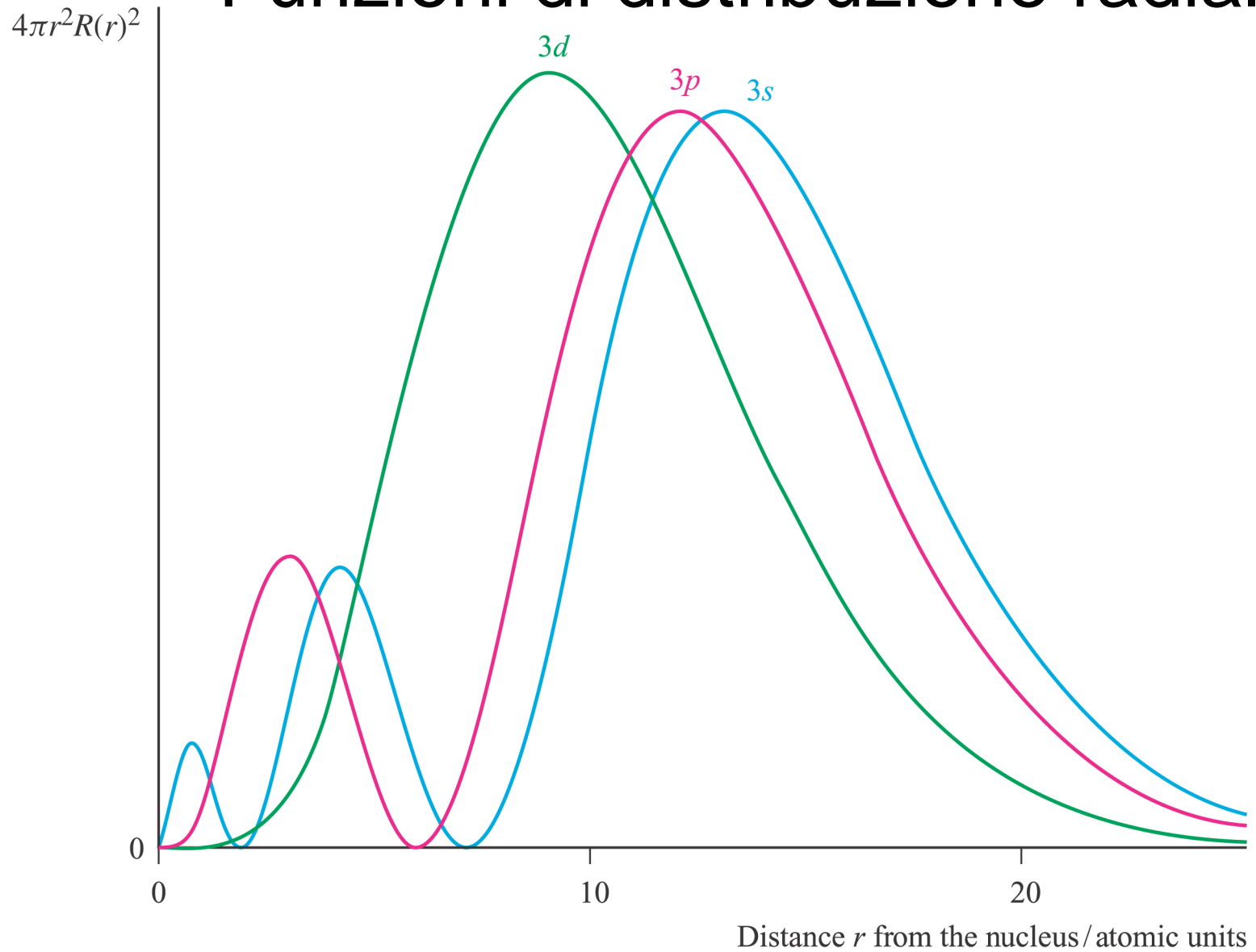
Funzioni di distribuzione radiale



- Hanno tutte almeno 1 massimo
- Sono nulle sul nucleo
- Al crescere di n gli orbitali diventano più **diffusi**

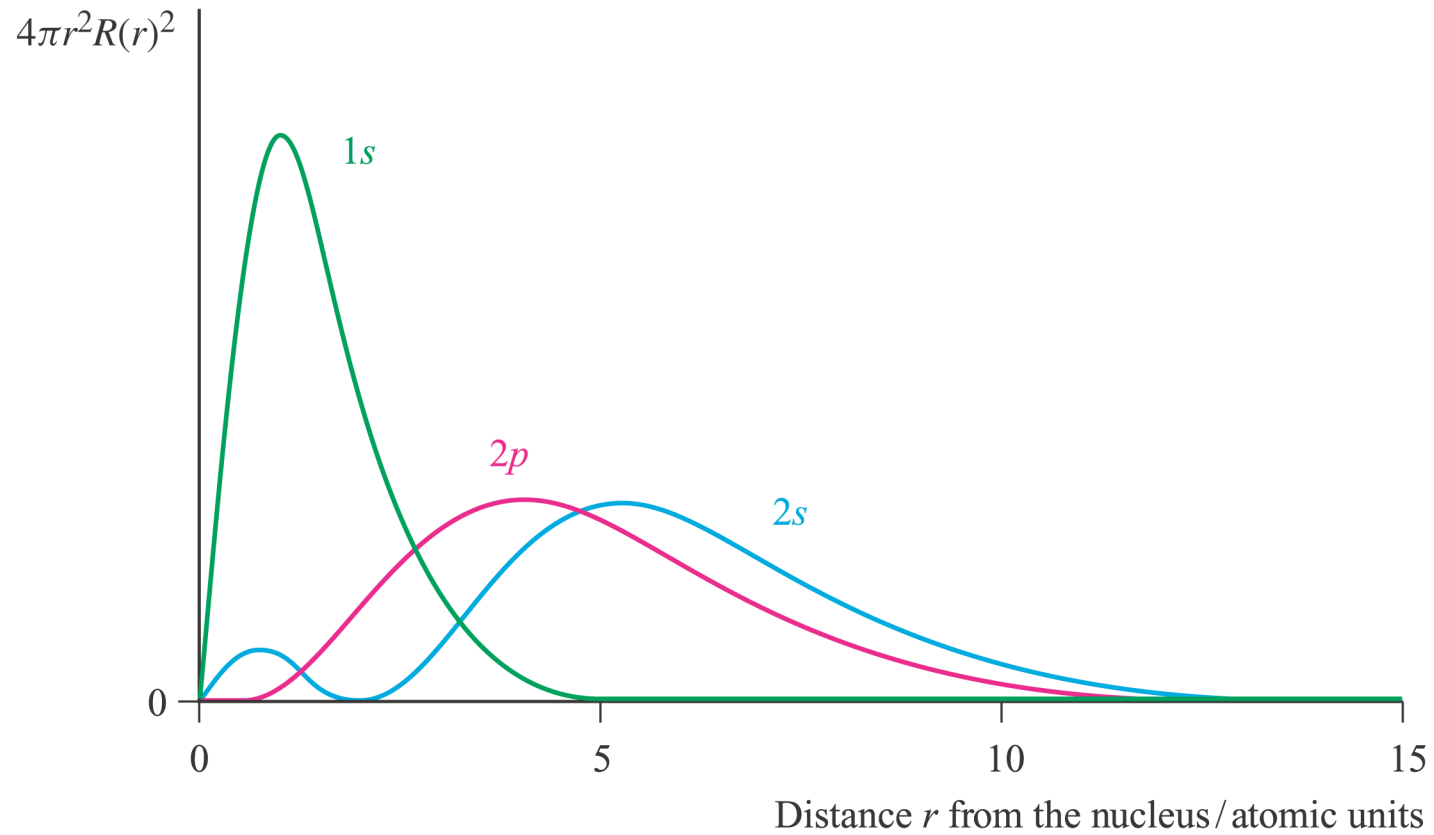
$n - 1$ massimi

Funzioni di distribuzione radiale



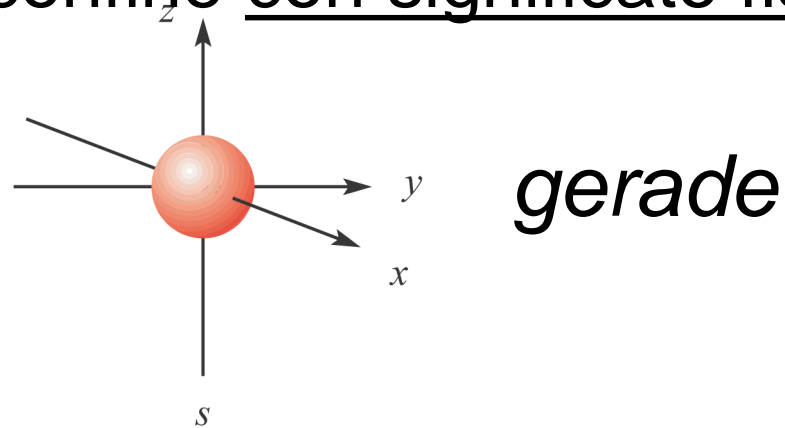
A parità di n , orbitali con l più piccolo sono più **penetranti**

Funzioni di distribuzione radiale

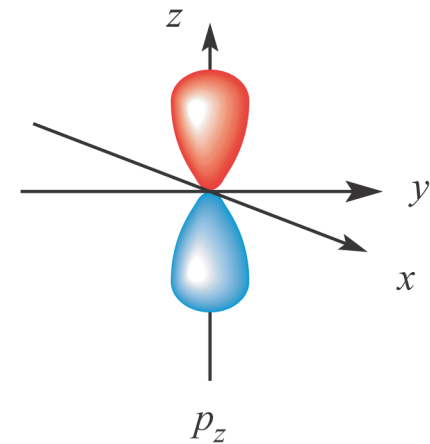
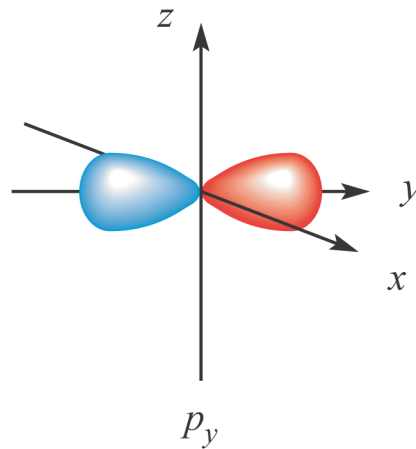
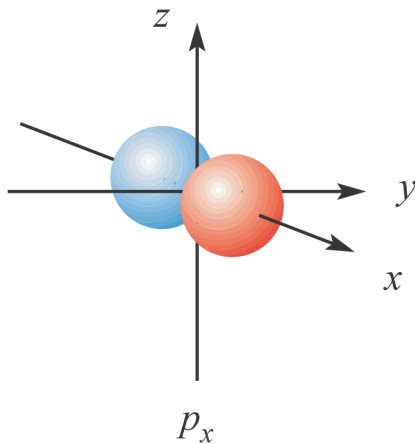


Funzione di distribuzione angolare $A(\theta, \phi)^2$

Superfici di confine con significato fisico

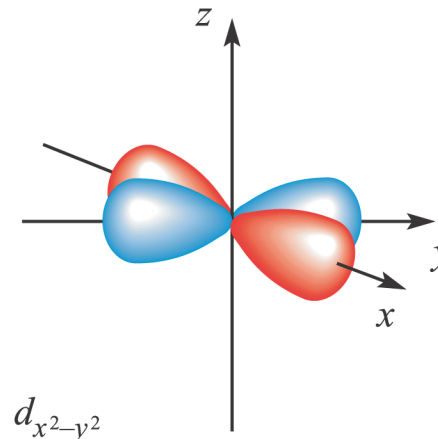
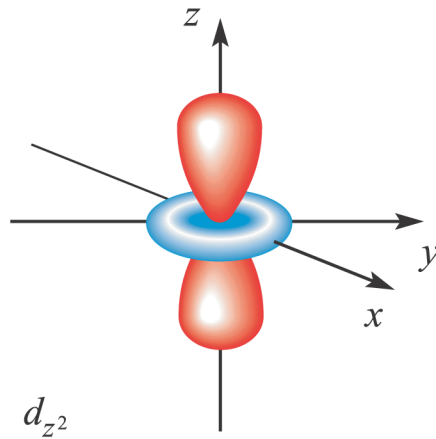
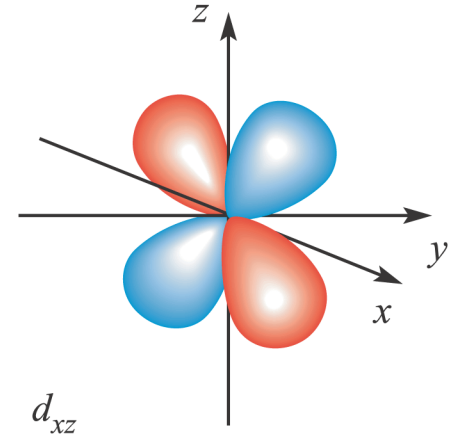
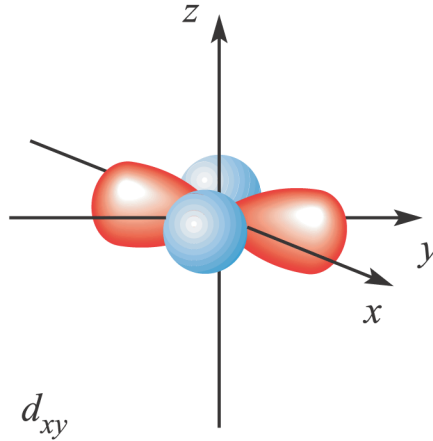
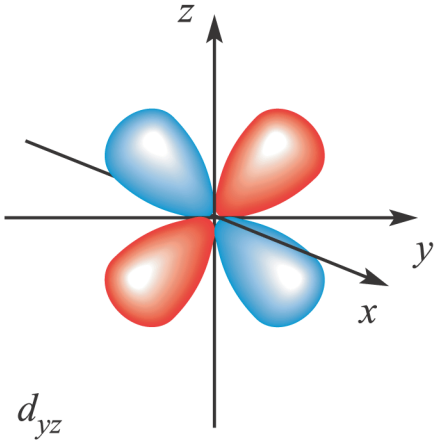


ungerade



$A(\theta, \phi)^2$ rappresenta la probabilità di trovare un elettrone in funzione dei due angoli θ e ϕ

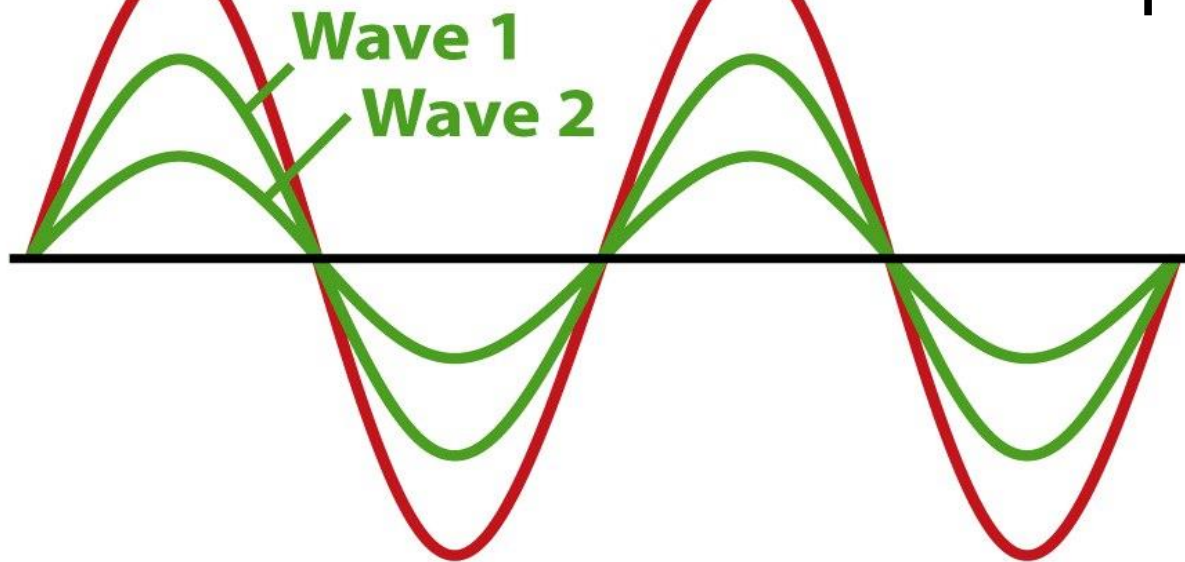
Superfici di confine con significato fisico, $A(\theta, \phi)^2$



gerade

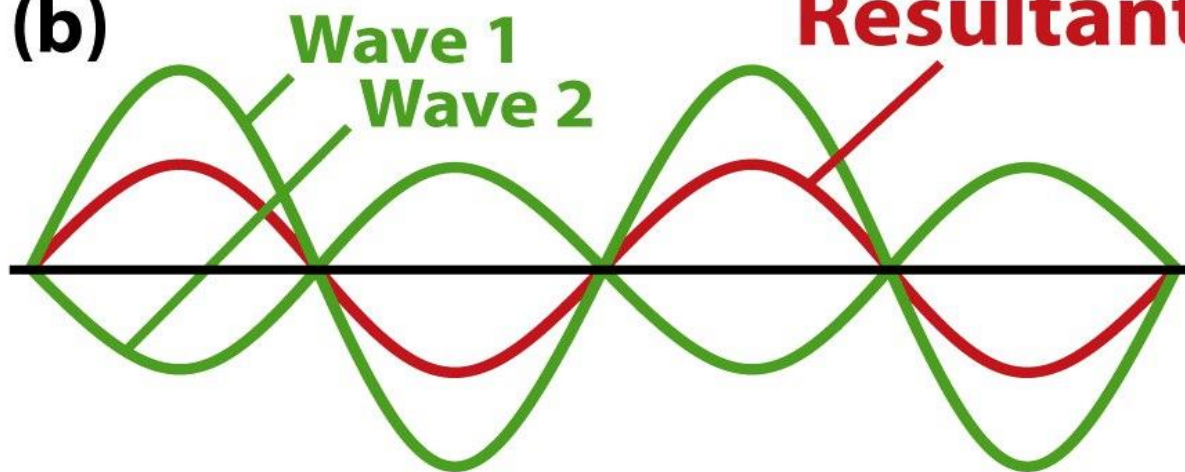
(a) Resultant

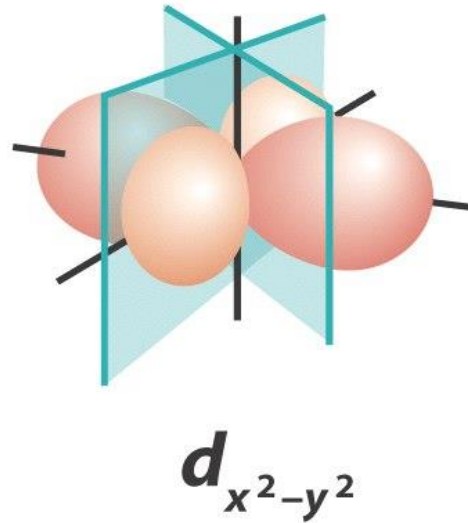
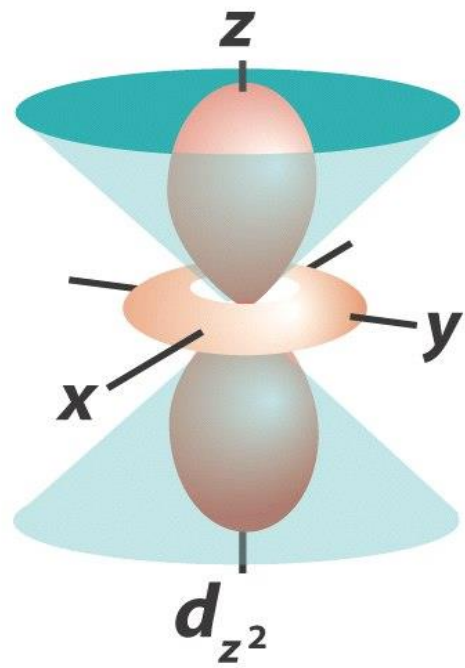
Importanza della fase



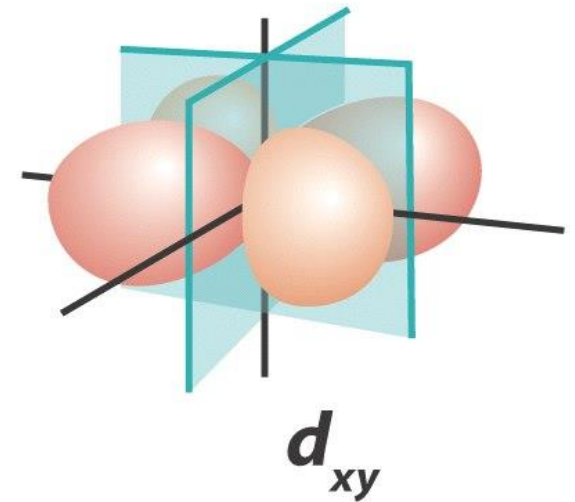
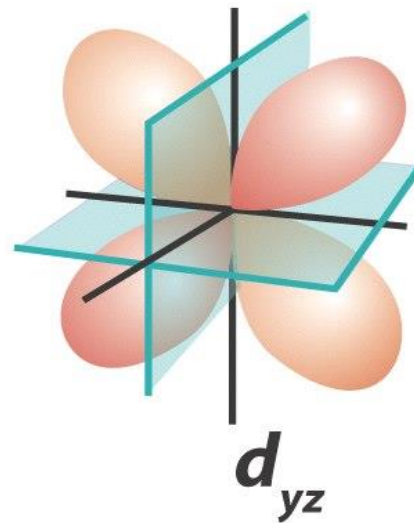
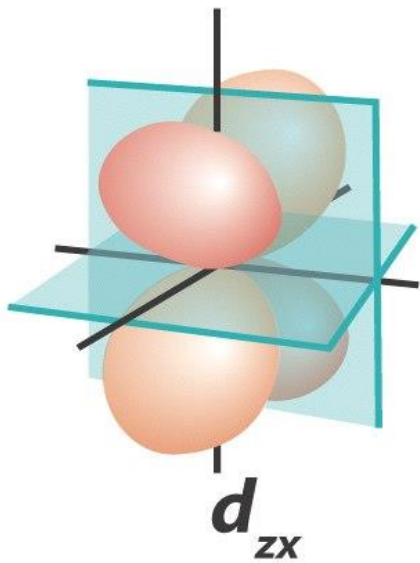
(b)

Resultant



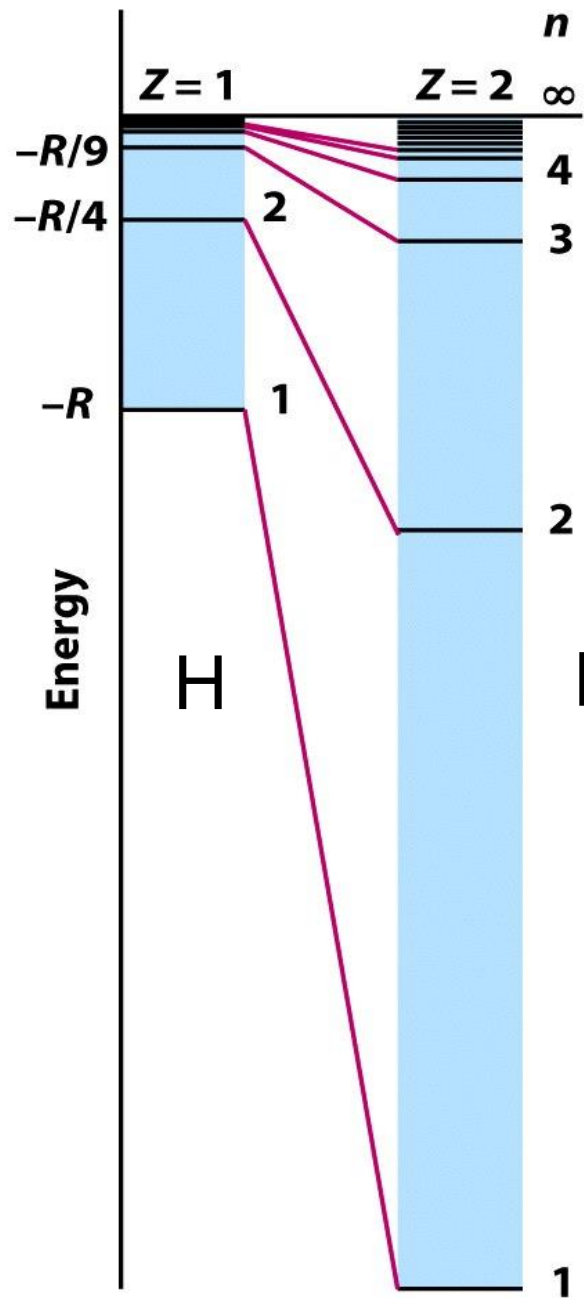


Le funzioni di distribuzione angolare hanno / piani nodali



eccellenti rappresentazioni degli orbitali si
possono trovare sul sito:

<http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/>



$$E = -kZ^2/n^2$$

$$k = 1.312 \times 10^3 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Subshells

