Libri di testo consigliati

In Italiano:
D.F. Shriver & P.W. Atkins
Chimica Inorganica
(II edizione, dalla V edizione Inglese)
Zanichelli

Weller, Overton, Rourke, Armstrong
La chimica inorganica di Atkins (III edizione 2021),
Zanichelli

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

Weller, Overton, Rourke, Armstrong
Inorganic Chemistry (International Edition)
Oxford

La chimica inorganica si occupa delle proprietà di tutti gli elementi della tavola periodica.

…..

Anche se varietà e diversità sono caratteristiche di qualsiasi studio di chimica inorganica, ci sono **modelli** e **tendenze** comuni che arricchiscono e migliorano la nostra comprensione dell'argomento. Queste tendenze di reattività, struttura, e proprietà degli elementi e dei loro composti forniscono una **razionalizzazione della tavola periodica** e costituiscono le basi su cui costruire una comprensione più profonda della chimica degli elementi e dei loro composti.

La chimica inorganica ha un notevole **impatto** sulla nostra vita quotidiana e su altre discipline scientifiche. L'industria chimica dipende fortemente dalla chimica inorganica in quanto essa è essenziale per la formulazione e il miglioramento di materiali e composti moderni usati come catalizzatori, materiali per l'immagazzinamento dell'energia, materiali semiconduttori, optoelettronici, superconduttori e ceramici avanzati. L'impatto della chimica inorganica sulla nostra vita a livello ambientale, biologico e medico è enorme.

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

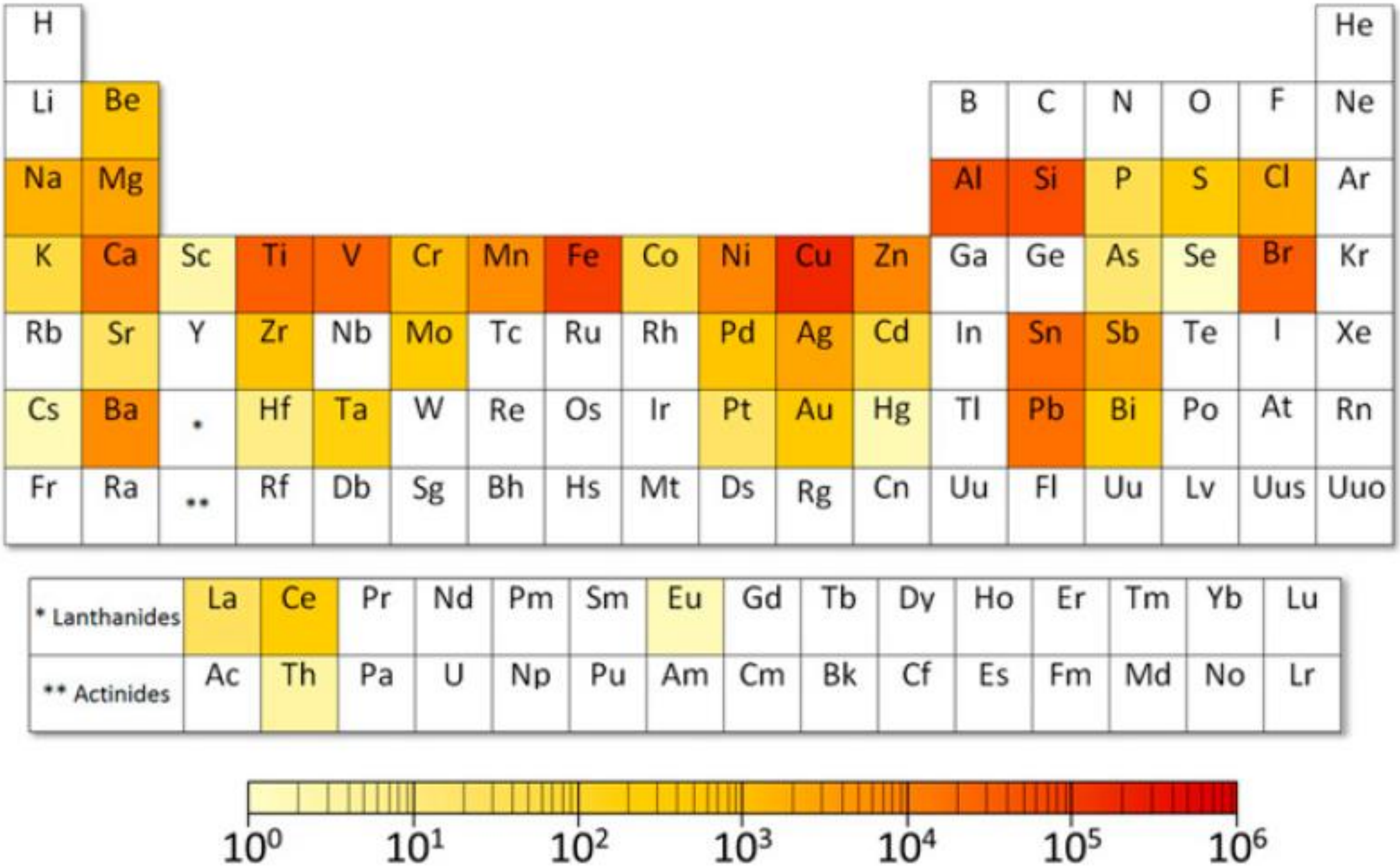
Alternative Energy

Ru, Nd, Tb, Dy, Pr

McGroarty, D. *Wall Street Journal* 1/31/13

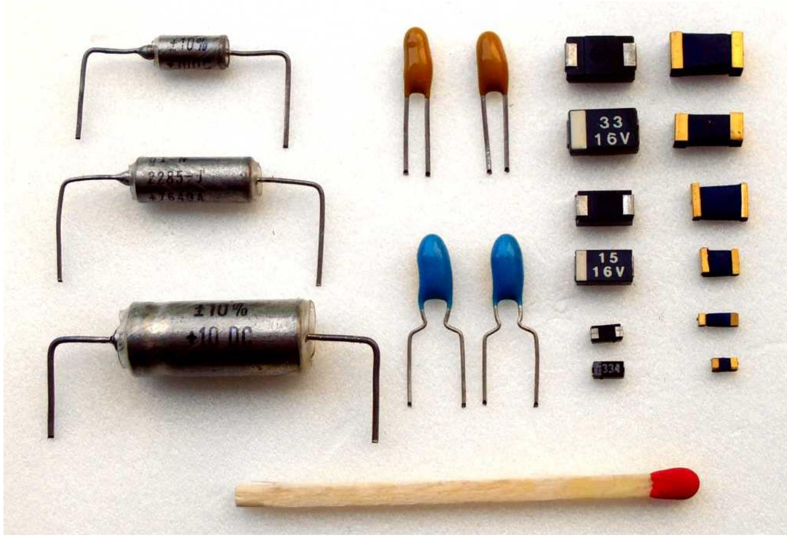
Jaffe, R. *2011 APS-MRS Report*

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



Columbite – Tantalite = ***Coltan***

$(Fe,Mn)(Nb_n,Ta_m)_2O_6$



The Leopard (Jo Nesbø, 2009)

- 1801: annunciata la scoperta di un nuovo elemento chiamato **columbio**
- 1809: si conclude, erroneamente, che esso non fosse altro che il già noto **tantalio**
- 1846: scoperto un altro “nuovo” elemento, chiamato **niobio**
- 1865: si dimostra sperimentalmente che **columbio** e **niobio** (non tantalio) erano lo stesso elemento
- 1949 all’elemento numero 41 venne ufficialmente attribuito il nome **niobio**

..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 = 6.626×10^{-34} J·s
ħ = h/2π = 1.052×10^{-34} J·s
a_0 = raggio di Bohr = 5.293×10^{-11} m = 52.93 pm = 0.529 Å
(1pm = 10^{-12} m;1Å = 10^{-10} m, cioè 1Å = 100 pm;
1 nm = 1000 pm, 1 nm = 10 Å)

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

Tappe verso la Meccanica Quantistica

De Broglie (1924): dualismo onda-particella per l'elettrone

Heisenberg (1926): principio di indeterminazione

Schrödinger (1926): equazione e funzione d'onda che descrive il comportamento ondulatorio dell'elettrone dell'**atomo di idrogeno** intorno al nucleo nello stato fondamentale

Equazione di Schrödinger

(caso monodimensionale)

$$\underbrace{- \hbar^2/2m \times d^2\Psi/dx^2}_{\textit{cinetica}} + \underbrace{V\Psi}_{\textit{potenziale}} = E\Psi$$

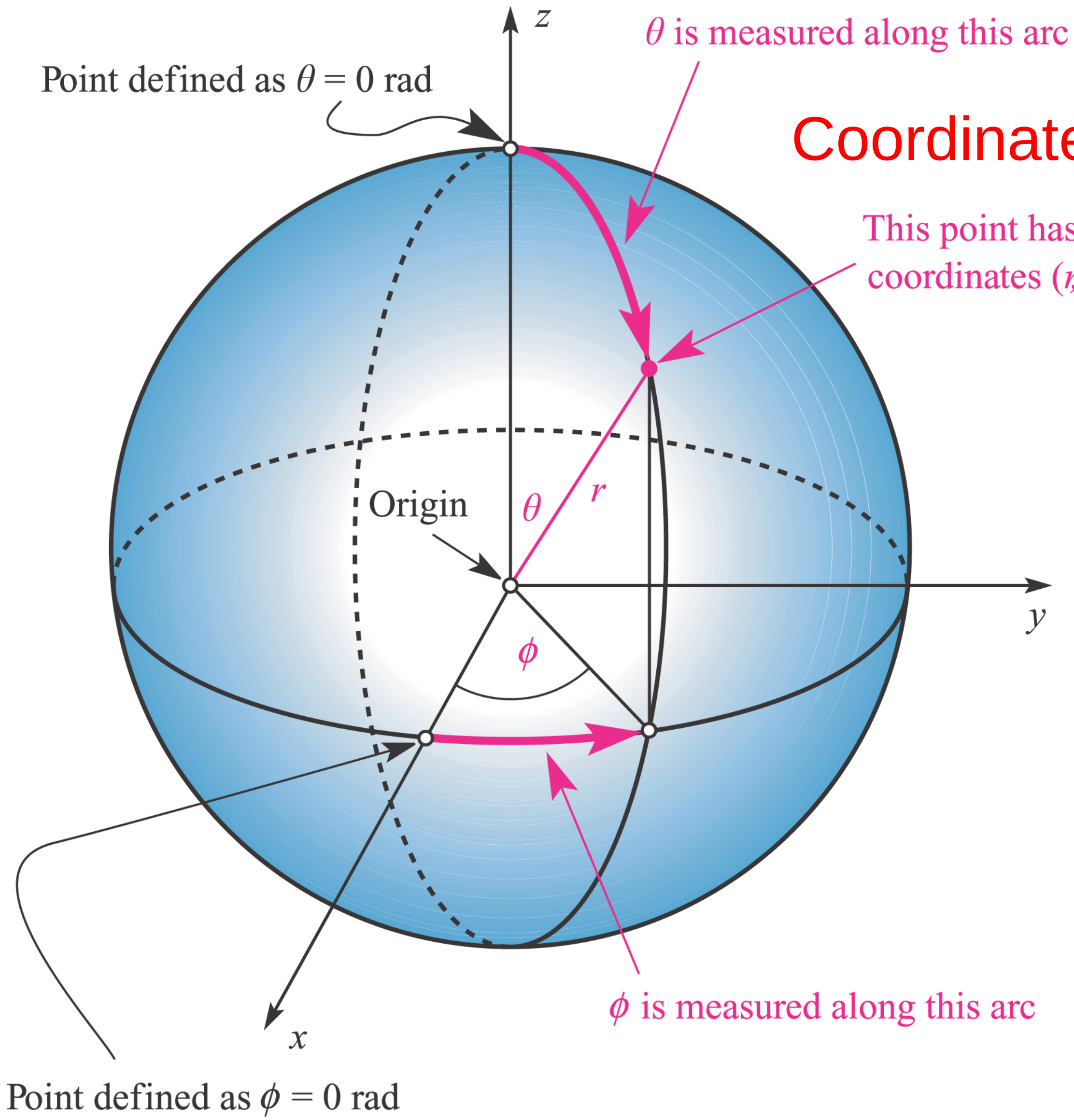
Ψ = funzione d'onda

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

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 <u>univocamente</u> da un set di 3 numeri interi, i **numeri quantici**, n, l ed m_l

n = **numero quantico principale**: energia, grandezza
n = 1, 2, 3, 4, ….. (valori interi)

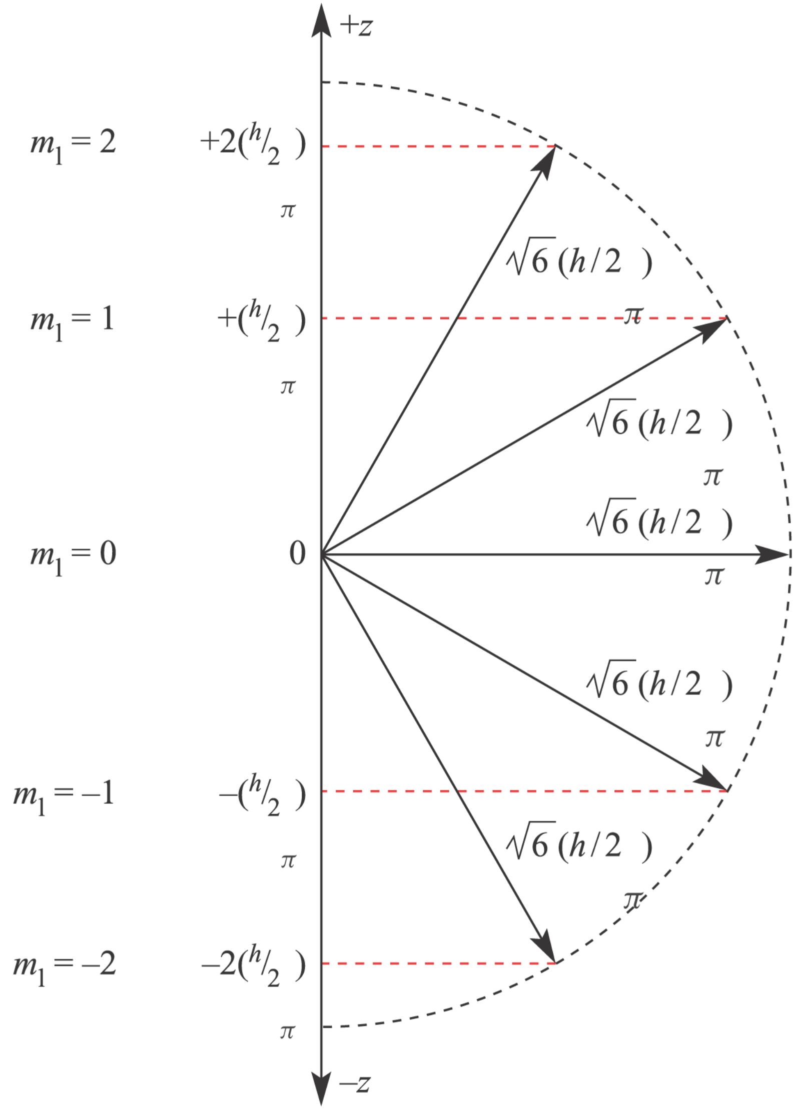
l = **numero quantico (del momento angolare) orbitale**: forma e momento angolare
l = 0, 1, 2, 3, 4….n-1 (in totale n valori interi)
s, p, d, f,…..
La grandezza del momento angolare orbitale è data da $h/2\pi \times \sqrt{l(l+1)}$

m_l = **numero quantico magnetico**: orientazione del momento angolare (e quindi dell'orbitale stesso).
m_l = $-l$, $-l+1$, ….0,…$l-1$, 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

Momento angolare associato a un elettrone in un orbitale d (l = 2) e sue componenti sull'asse z

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



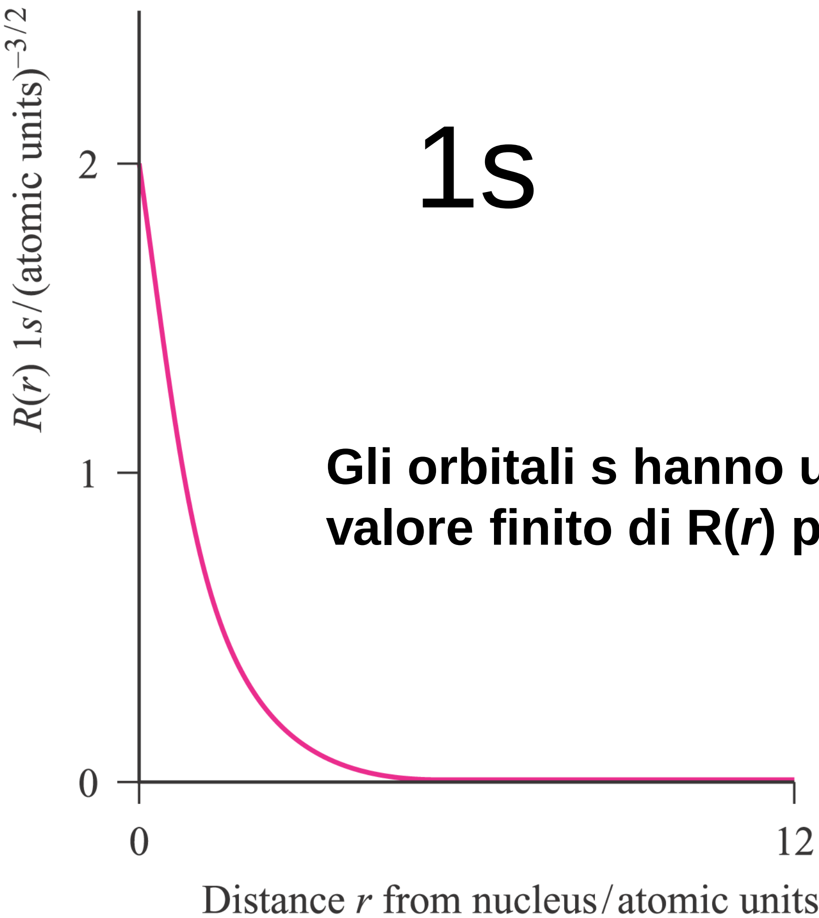
Funzioni d'onda per l'atomo H

Atomic orbital	n	l	m_l	Radial part of the wavefunction, $R(r)$[†]	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	$\frac{1}{2\sqrt{6}}r\,e^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\sin\theta\sin\phi)}{2\sqrt{\pi}}$

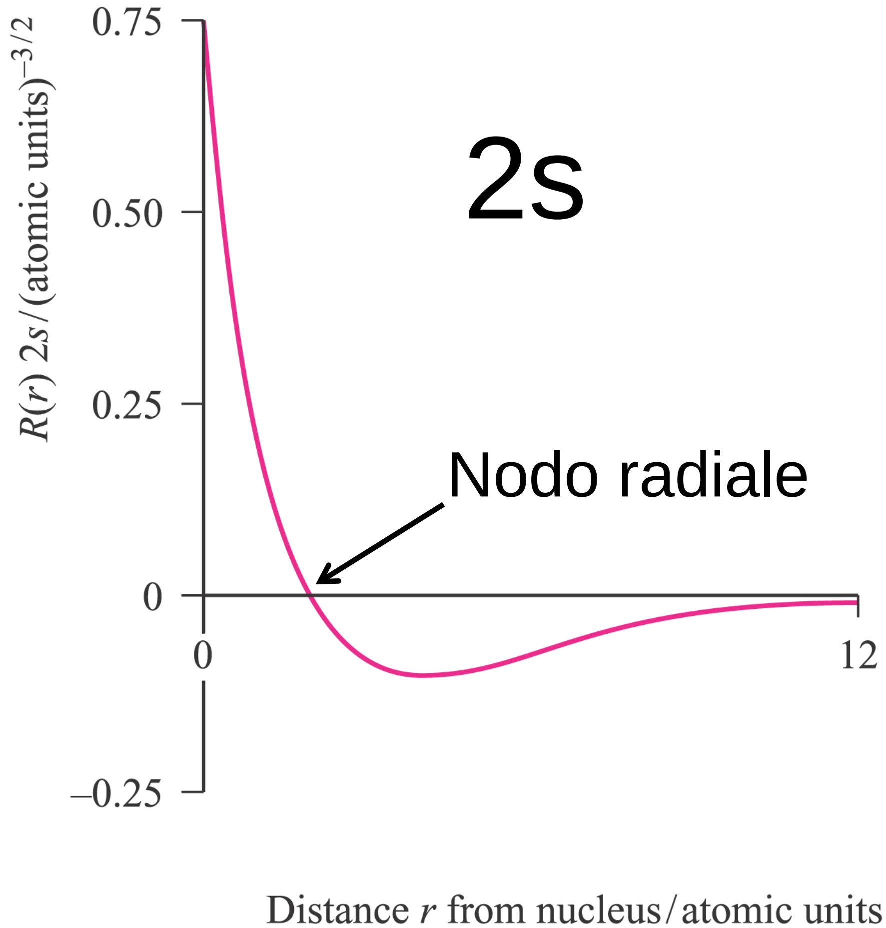
[†] For the $1s$ atomic orbital, the formula for $R(r)$ is actually $2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-Zr/a_0}$ but for the hydrogen atom, $Z = 1$ and $a_0 = 1$ atomic unit. Other functions are similarly simplified.

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

Componente radiale della funzione d'onda

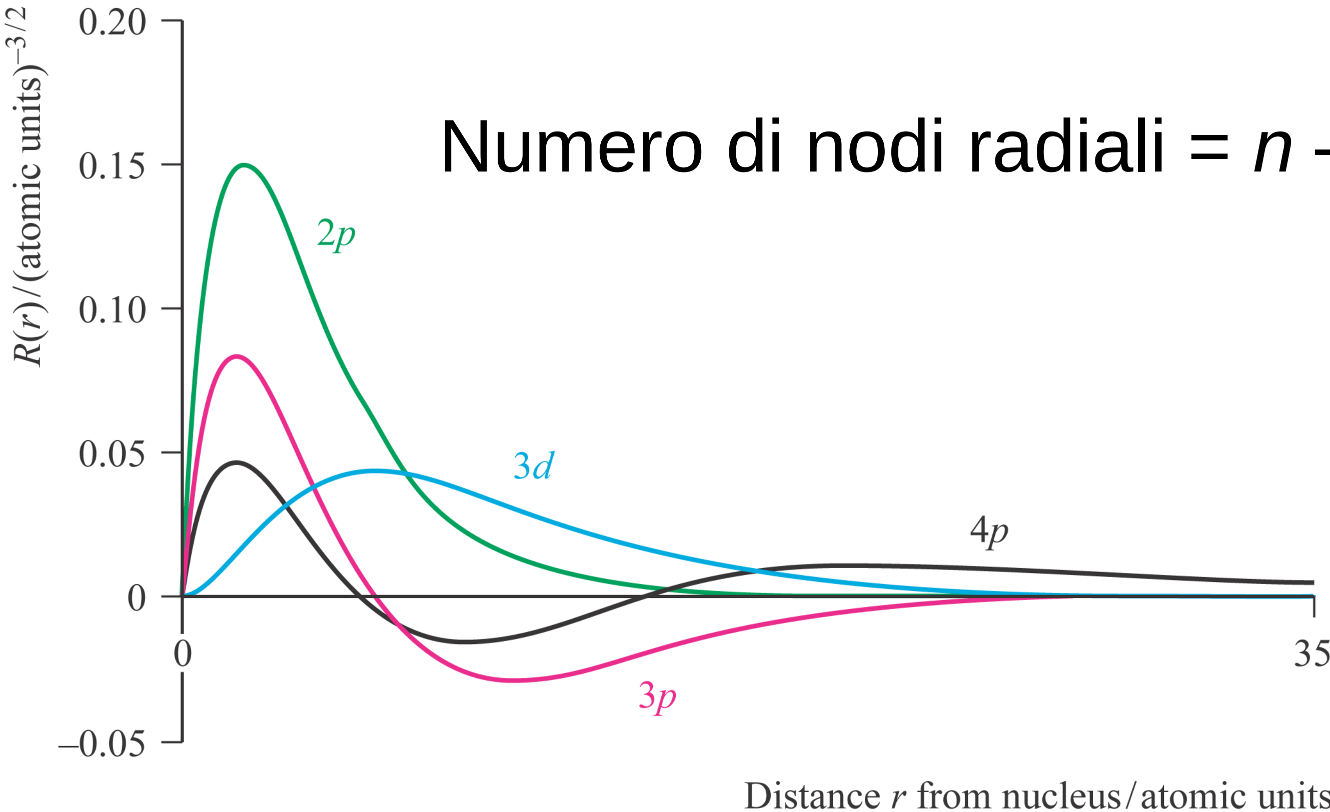


Gli orbitali s hanno un valore finito di R(*r*) per *r* = 0



Componente radiale della funzione d'onda

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

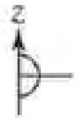
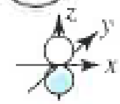
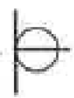
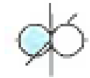
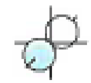
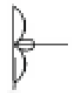
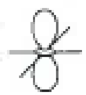
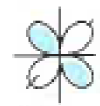
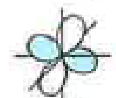
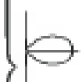
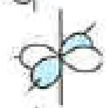
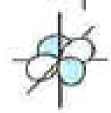


$$\Psi(x, y, z) = R_{n,l}(r) \cdot A_{l,m}(\theta, \phi)$$

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	$\frac{1}{2\sqrt{6}}r\,e^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\sin\theta\cos\phi)}{2\sqrt{\pi}}$
$2p_z$	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 $2(\frac{Z}{a_0})^{\frac{3}{2}}\,e^{-Zr/a_0}$ but for the hydrogen atom, $Z = 1$ and $a_0 = 1$ atomic unit. Other functions are similarly simplified.

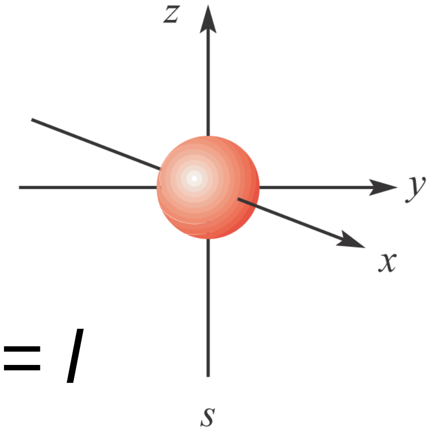
TABELLA 2.3 Funzioni d'onda dell'atomo di idrogeno: funzioni angolari

Fattori angolari					Funzioni d'onda reali			
Legate al momento angolare				Funzioni di θ	In coordinate polari	In coordinate cartesiane	Forme	Nome
l	m_l	Φ	Θ		$\Theta\Phi(\theta,\phi)$	$\Theta\Phi(x,y,z)$		
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	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2}\cos\theta$		$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{z}{r}$		p_z
	+1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$		$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sin\theta\cos\phi$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{x}{r}$		p_x
	−1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$		$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\sin\theta\sin\phi$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\frac{y}{r}$		p_y
2(*d*)	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{2}}(3\cos^2\theta - 1)$		$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\frac{(2z^2 - x^2 - y^2)}{r^2}$		d_{z^2}
	+1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{2}\cos\theta\sin\theta$		$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\cos\theta\sin\theta\cos\phi$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\frac{xz}{r^2}$		d_{xz}
	−1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{2}\cos\theta\sin\theta$		$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\cos\theta\sin\theta\sin\phi$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\frac{yz}{r^2}$		d_{yz}
	+2	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{2i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{4}\sin^2\theta$		$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin^2\theta\cos 2\phi$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\frac{(x^2 - y^2)}{r^2}$		$d_{x^2-y^2}$
	−2	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-2i\phi}$	$\frac{\sqrt{15}}{4}\sin^2\theta$		$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\sin^2\theta\sin 2\phi$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{\pi}}\frac{xy}{r^2}$		d_{xy}

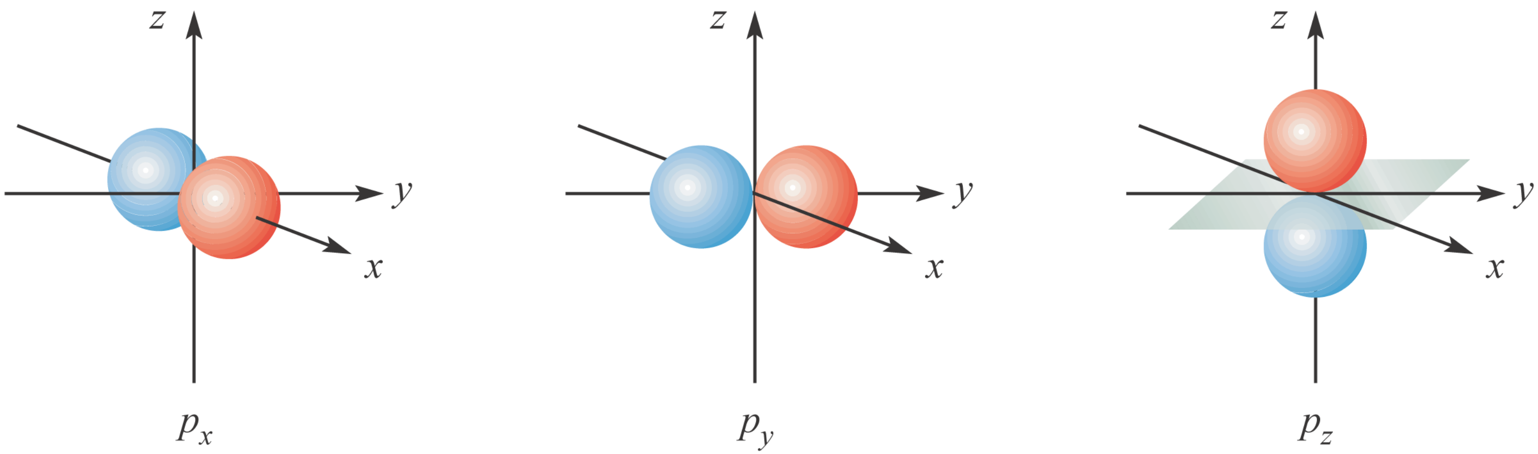
Le combinazioni di solito scelte per alcuni orbitali p e d sono la somma e la differenza dei cosiddetti fattori angolari. Per esempio, i fattori angolari p con m_l = +1 e –1 (funzioni complesse), normalizzati e quindi moltiplicati rispettivamente per le costanti $1/\sqrt{2}$ e $i/\sqrt{2}$.

in equazioni differenziali come quella di Schroedinger, ogni combinazione lineare di soluzioni dell’equazione, cioè somme o differenze delle funzioni, ciascuna moltiplicata per un qualunque coefficiente, è anch’essa una soluzione dell’equazione

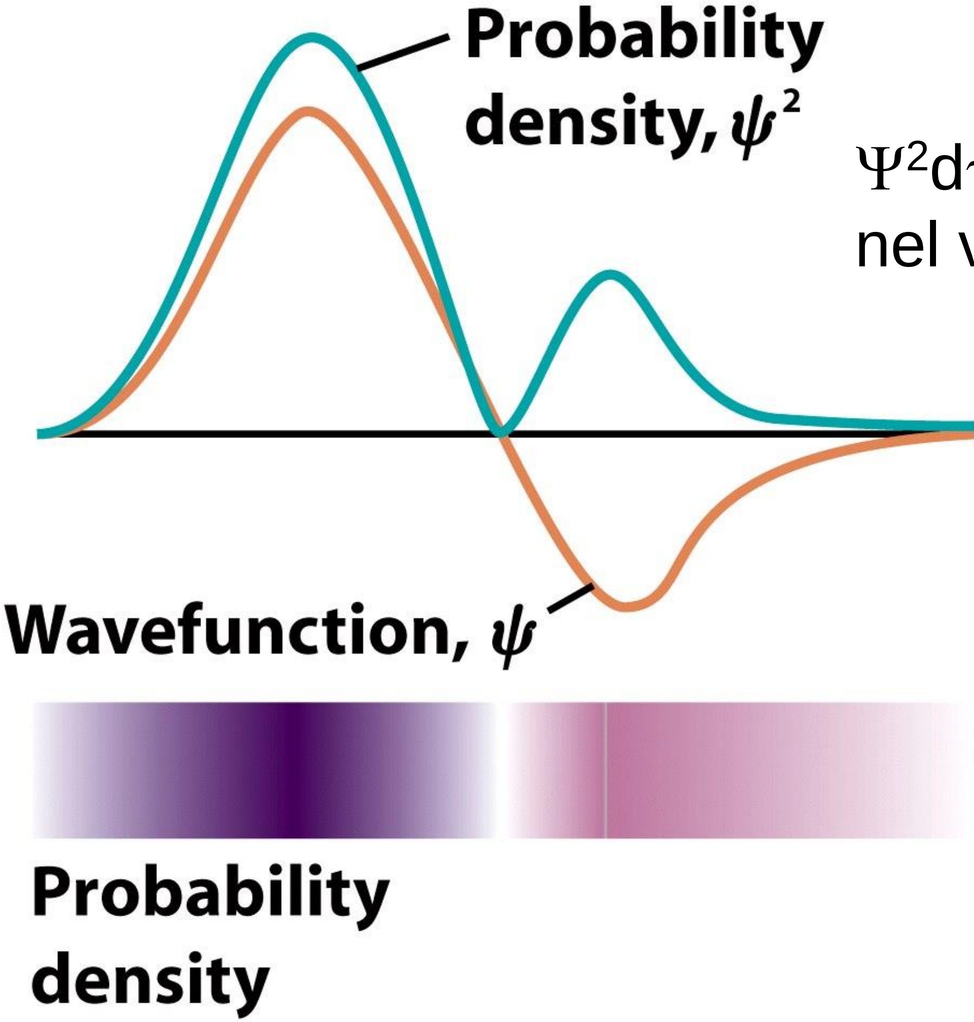
Superfici di confine senza significato fisico, A (θ, ϕ)



Numero di piani nodali = *l*



Ψ^2 = funzione densità di probabilità

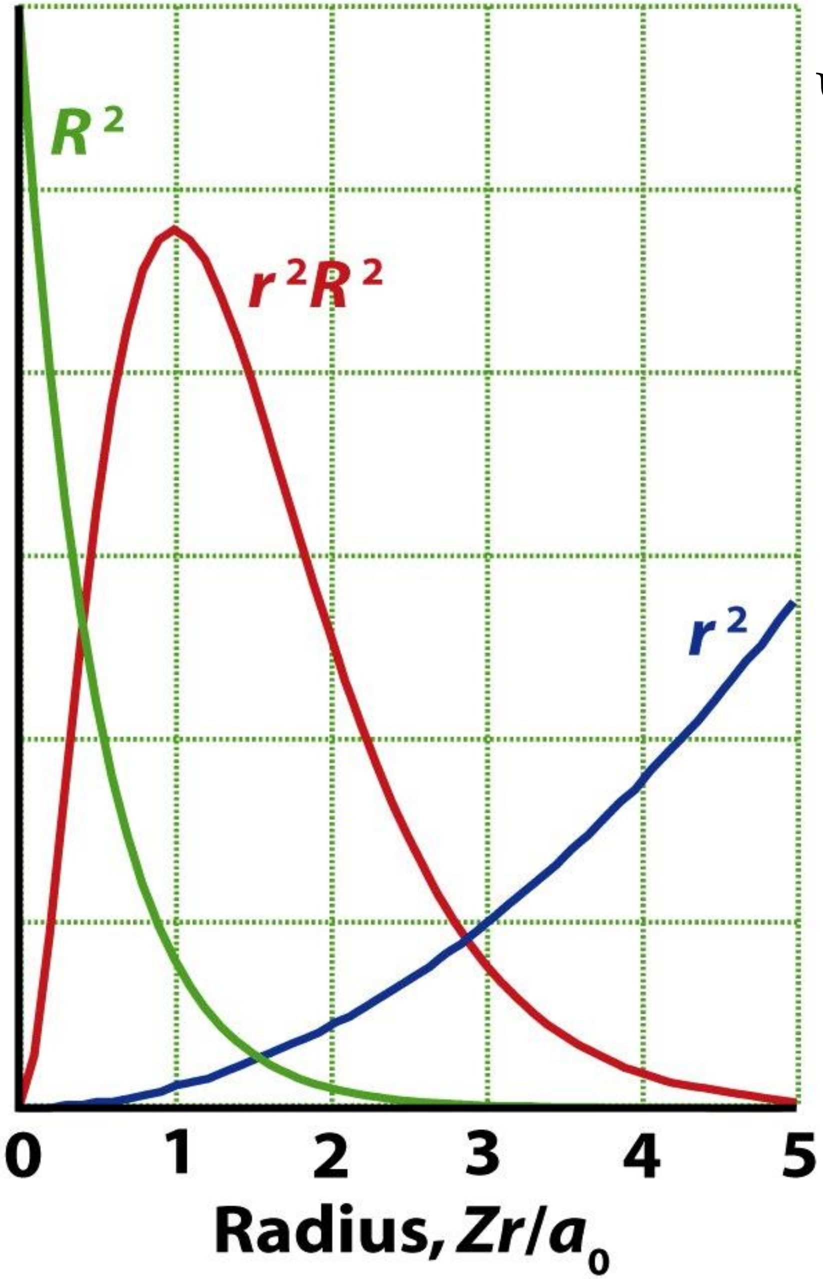


$\Psi^2 d\tau$ = probabilità di trovare l'elettrone nel volume infinitesimo $d\tau$

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

normalizzazione

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



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

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 Ψ^2dr esteso su tutti gli angoli

Orbitale 1s

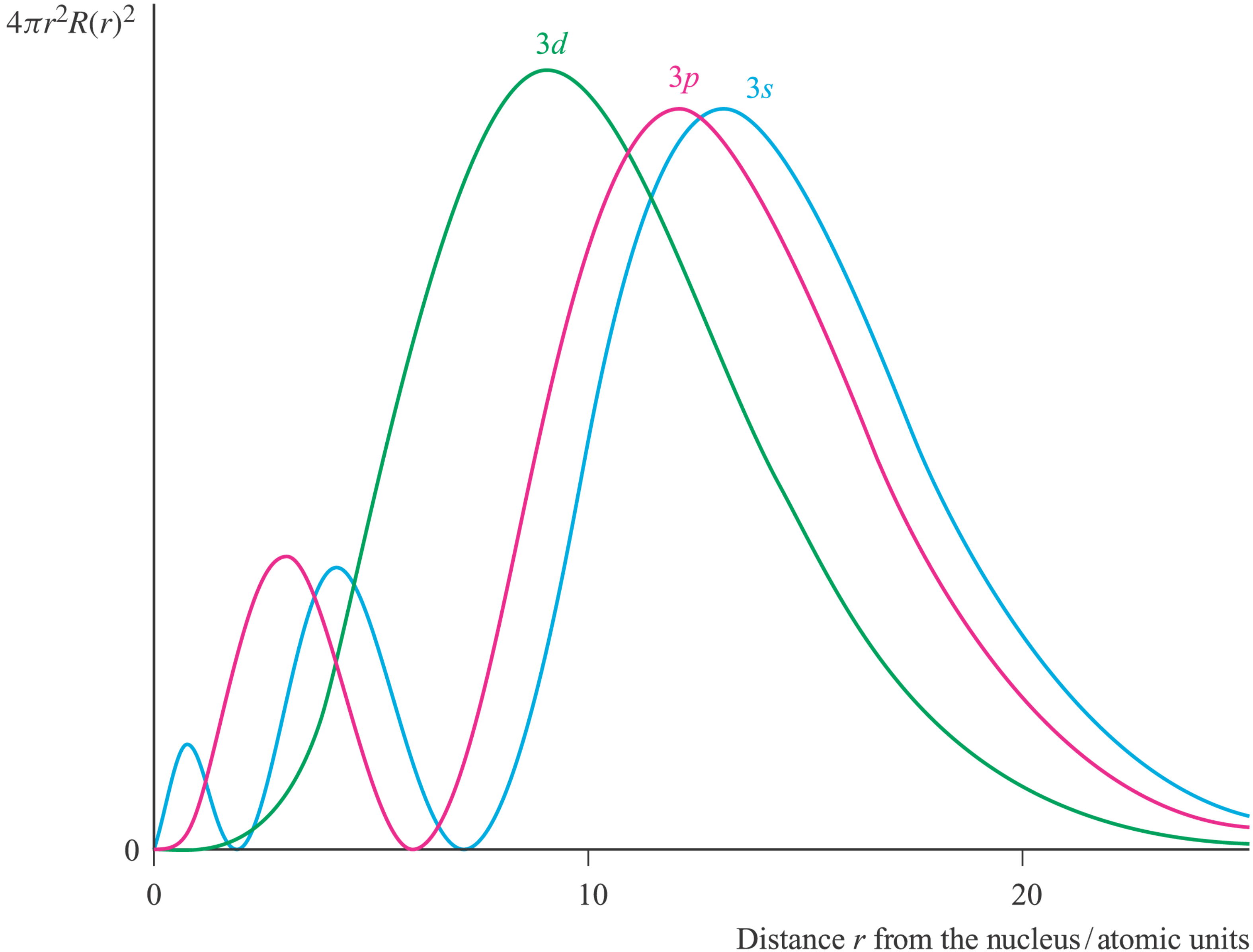
$$P(r) = 4\pi r^2 \Psi^2$$

Funzioni di distribuzione radiale

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

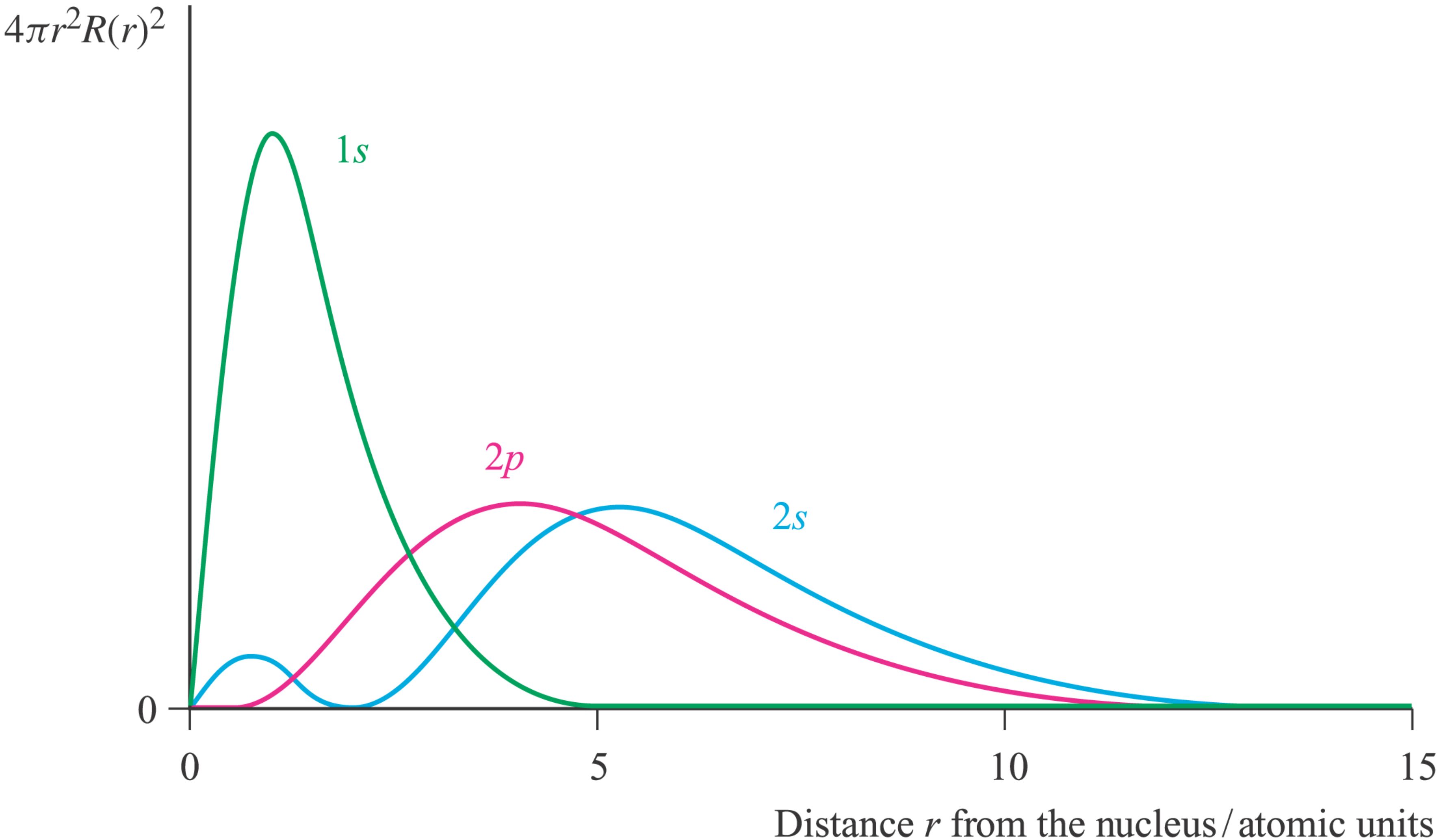
n – *l* massimi

Funzioni di distribuzione radiale



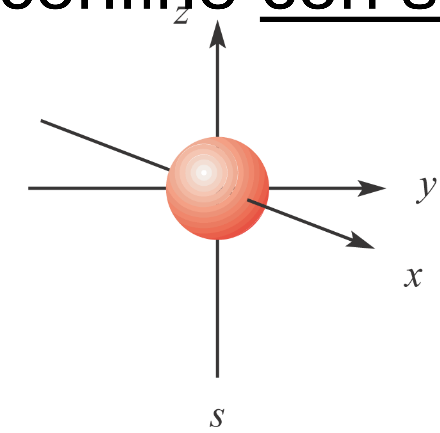
A parità di *n*, orbitali con *l* più piccolo sono più **penetranti**

Funzioni di distribuzione radiale



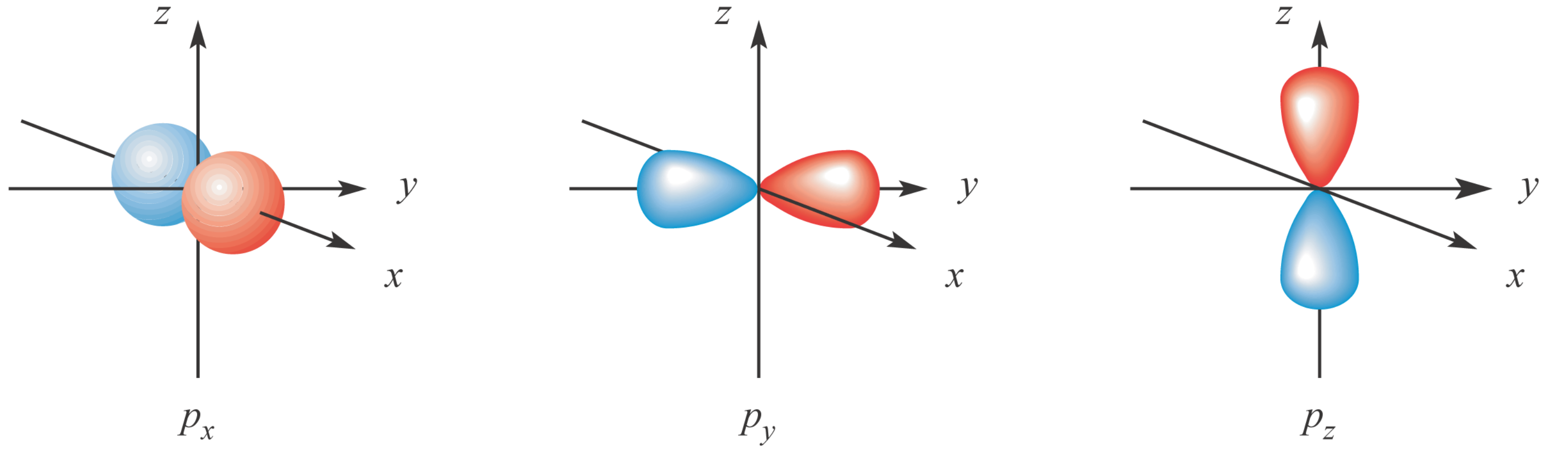
Funzione di distribuzione angolare A (θ, ϕ)^2

Superfici di confine <u>con significato fisico</u>



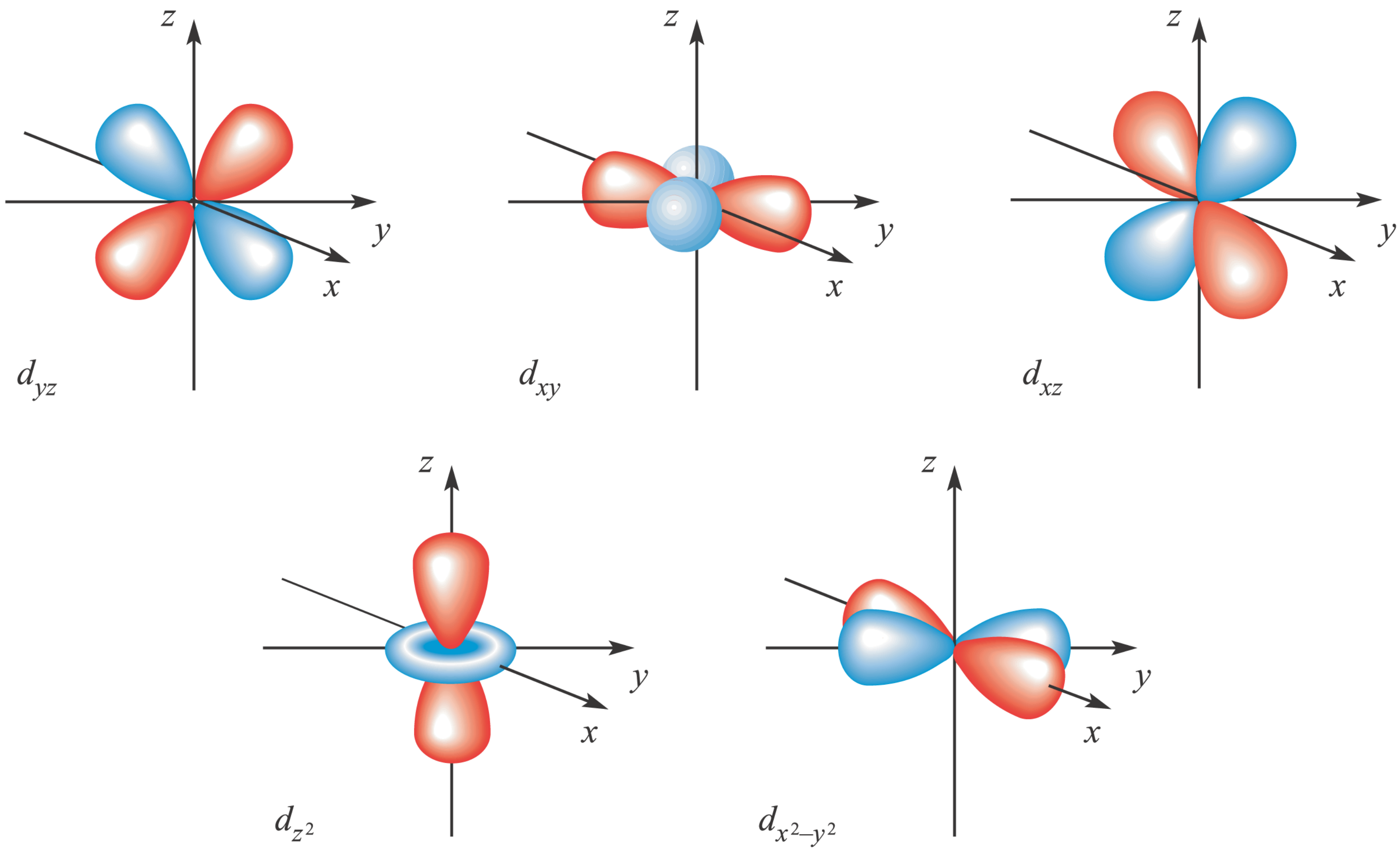
gerade

ungerade



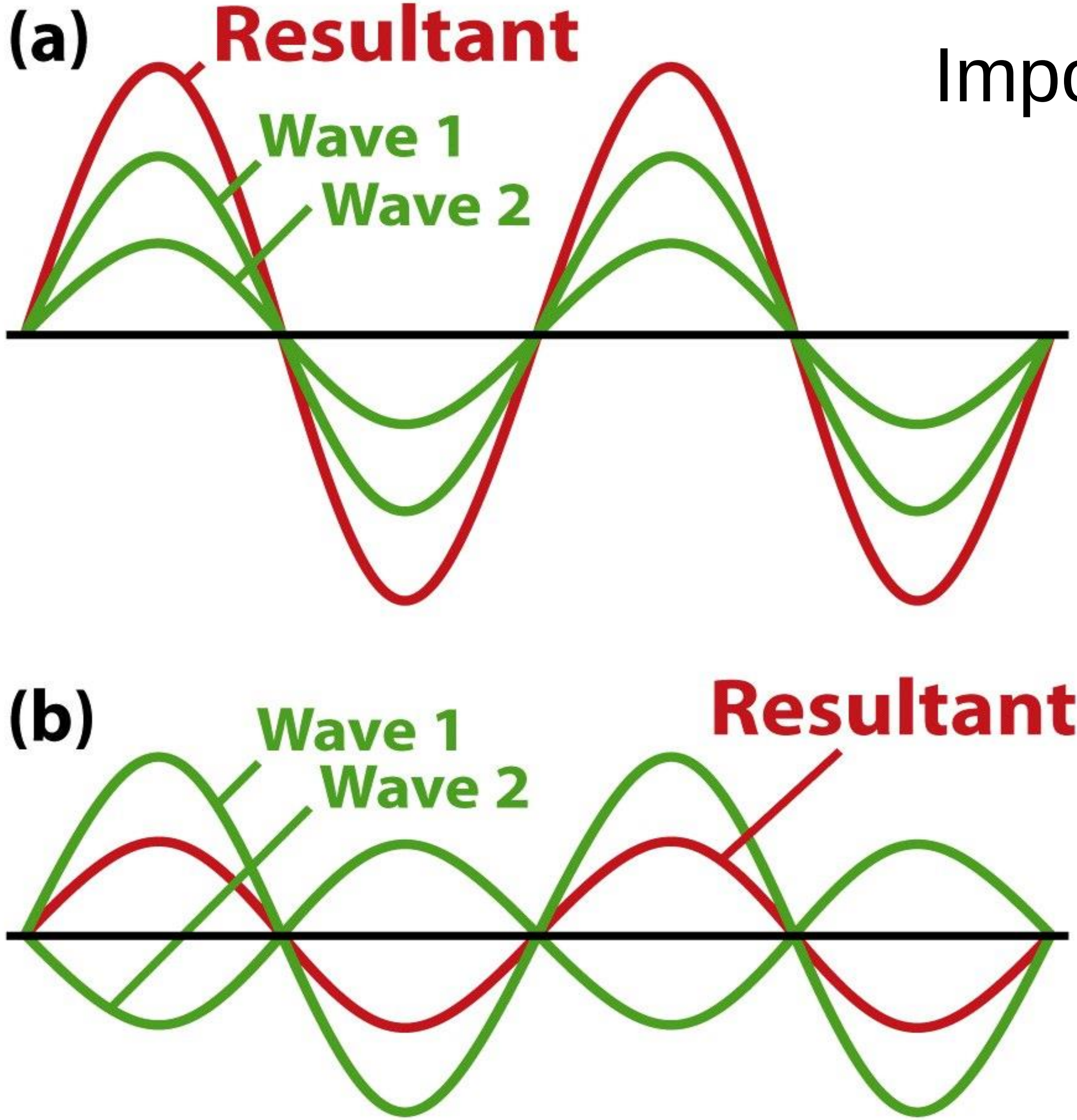
A(θ, ϕ)^2 rappresenta la probabilità di trovare un elettrone in funzione dei due angoli θ e ϕ

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

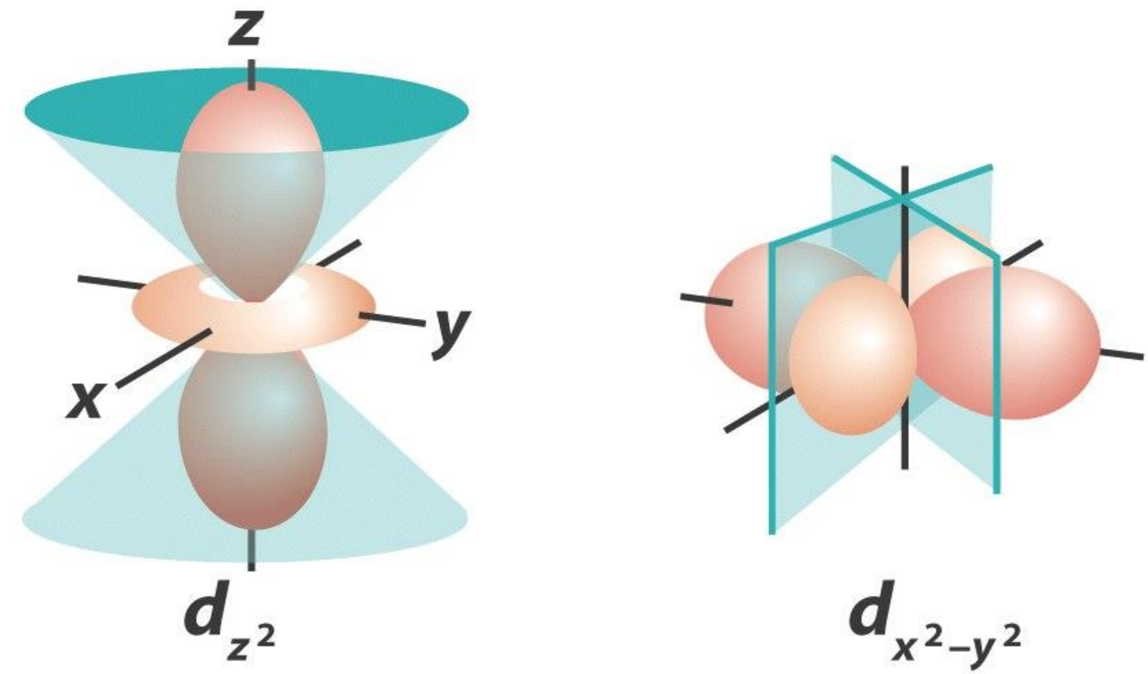


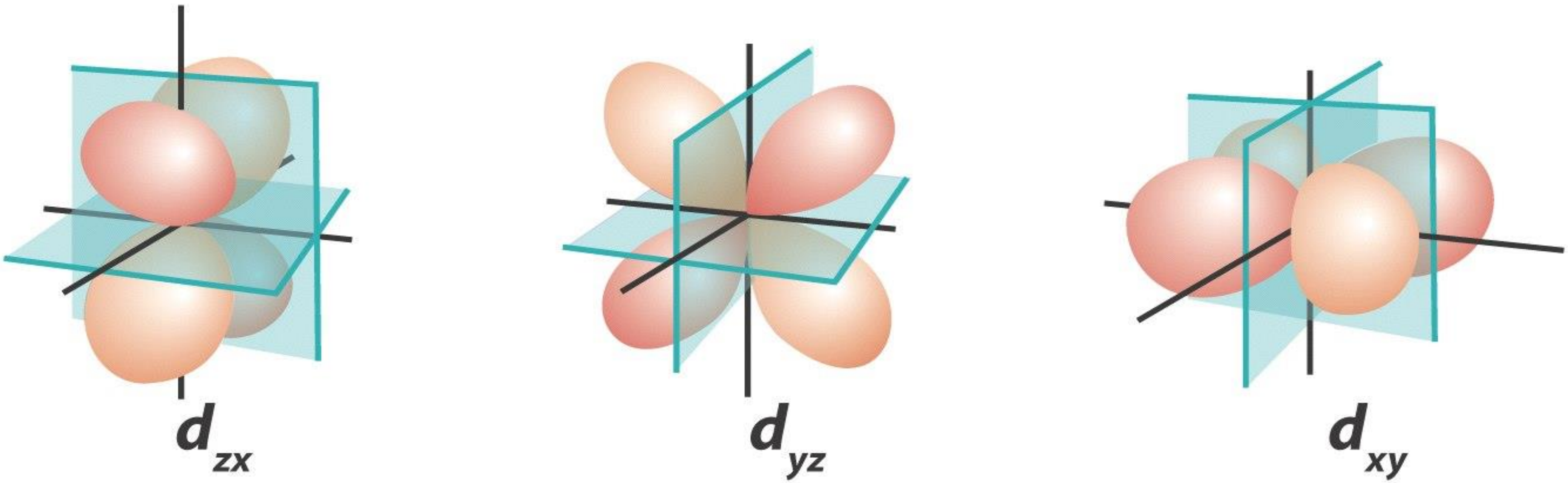
gerade

Importanza della fase



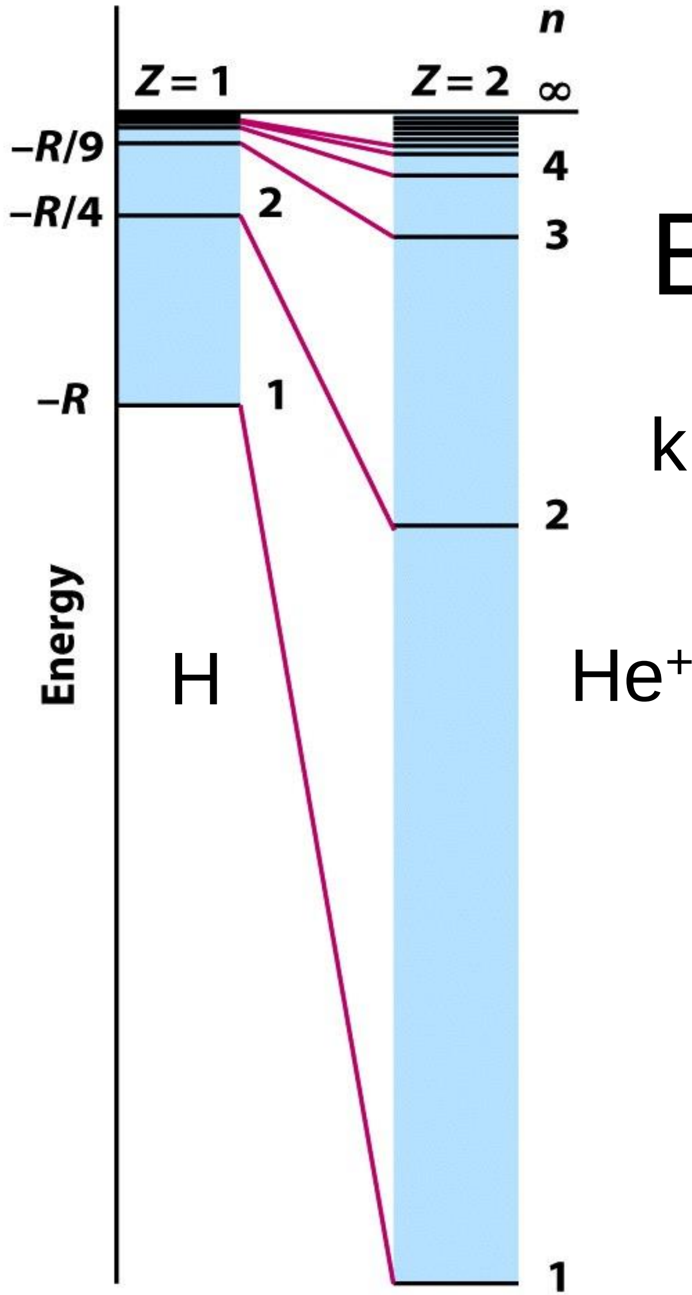
Le funzioni di distribuzione angolare hanno / piani nodali





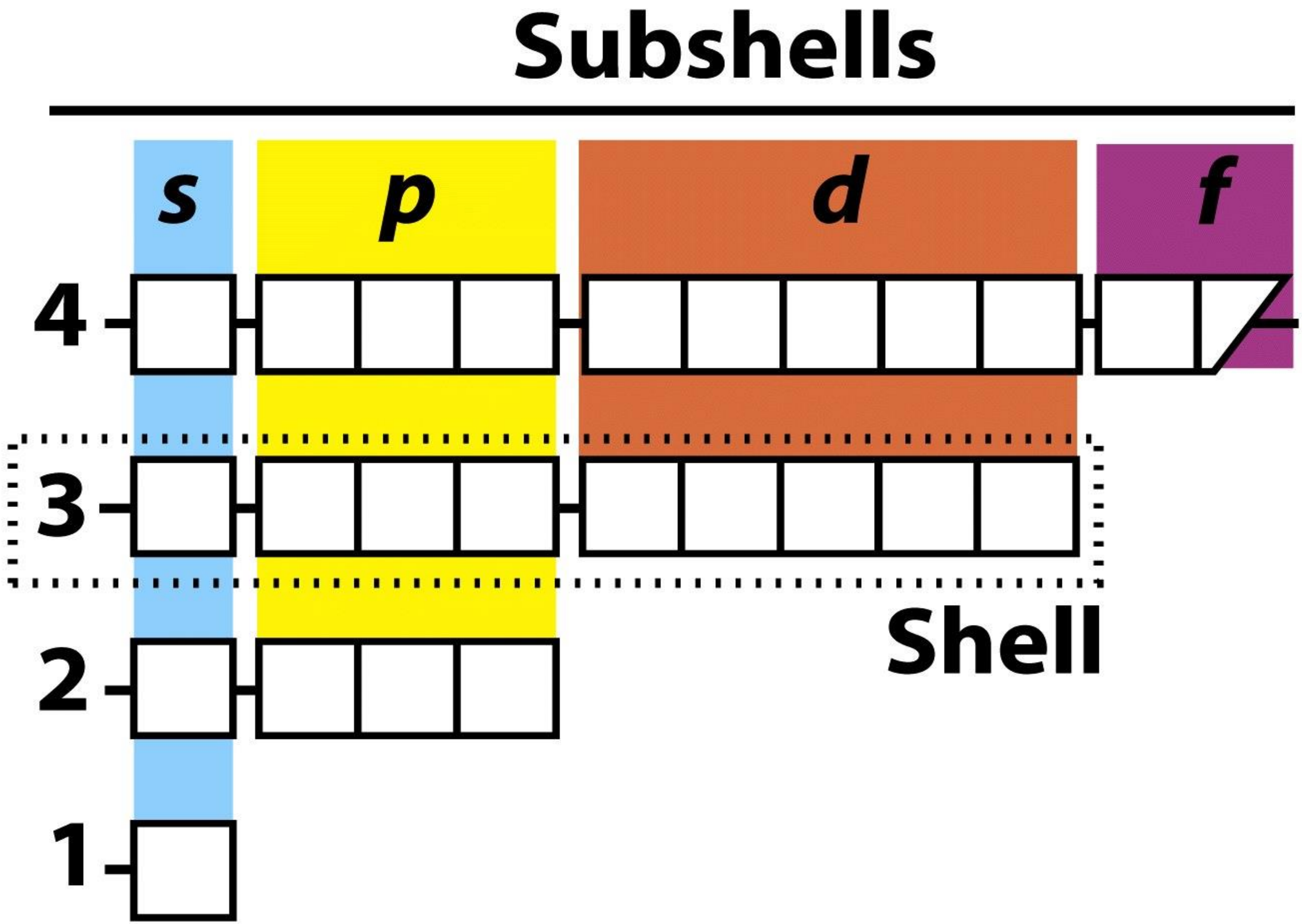
eccellenti rappresentazioni degli orbitali si possono trovare sul sito:

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



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

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


Subshells
s
p
d
f
4
3
2
1
Shell