

Questionario a.a. 2022-2023  
ORGANIZZAZIONE CORSO DI STUDI

Studente/studentessa 3 anno LT in Chimica

*Sarebbe carino avere professori umani e possibilmente con meno di 60 anni.*

# Libri di testo consigliati

## In Italiano:

C.E. Housecroft, A.G. Sharpe  
Chimica Inorganica  
(I edizione, dalla V edizione Inglese)  
Oiccin

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

Miessler e Tarr  
Chimica Inorganica  
Piccin

## In Inglese:

C.E. Housecroft, A.G. Sharpe  
Inorganic Chemistry (4th edition)  
Pearson

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



Peter Atkins 1940-

## Libri consigliati

Primo Levi

**Il Sistema Periodico**

Einaudi

Oliver Sacks

**Zio Tungsteno**

Adelphi

**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



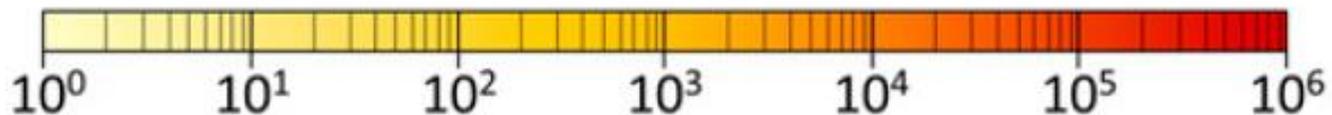
### Alternative Energy

Ru, Nd, Tb, Dy, Pr

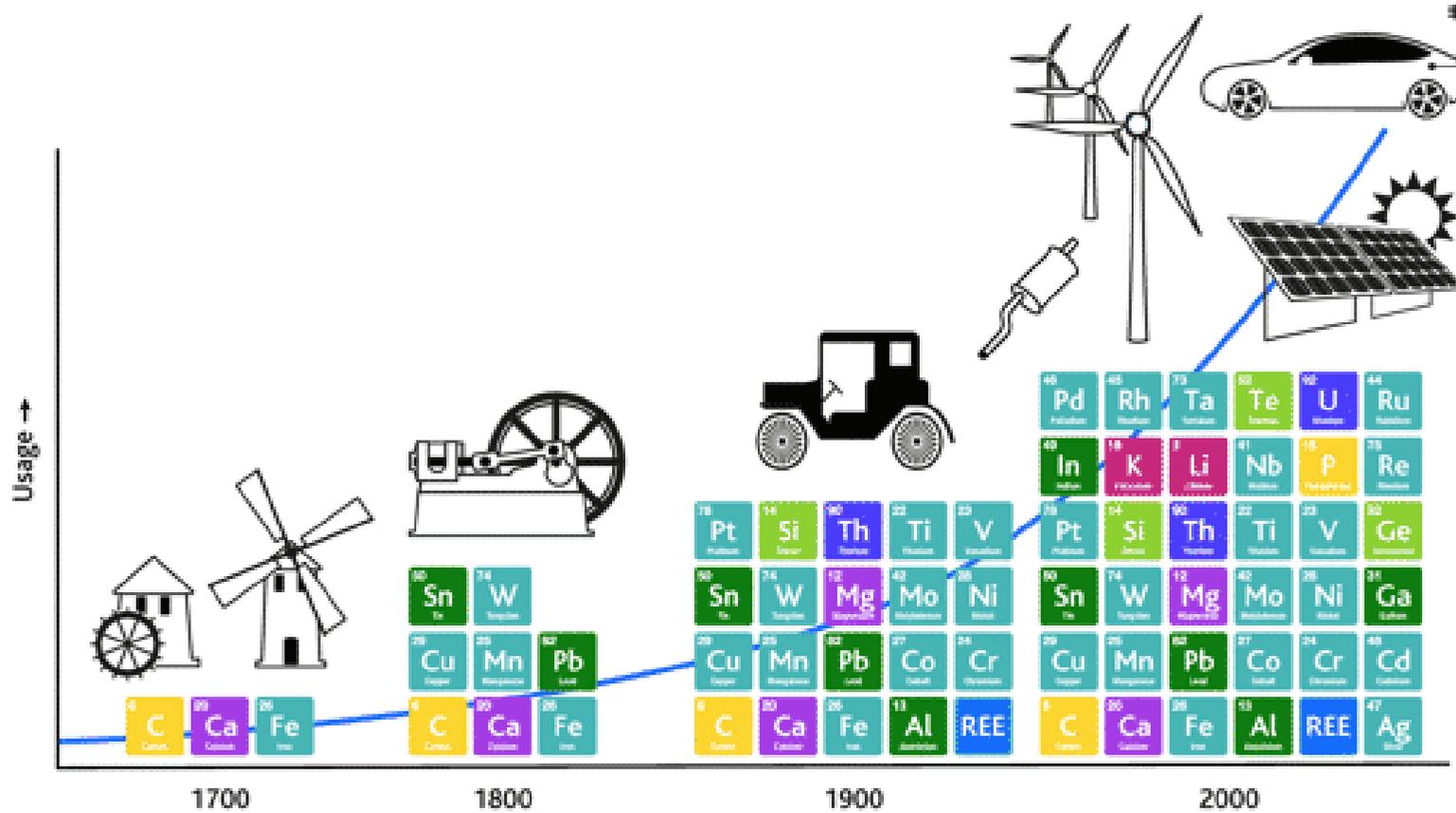
# Concentrazione (in ppm) dei 44 elementi che si trovano in un comune circuito elettronico stampato

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



# Elements widely used in energy pathways



NB: Position on both axes is indicative only



MATERIE PRIME



Rame, litio e cobalto: la corsa dei prezzi fa riaprire le miniere, i giacimenti in Italia e gli obiettivi del governo



AUTONOMIA STRATEGICA



Il ministro Urso: «Entro fine anno le norme per riaprire le miniere in Italia, stiamo già aggiornando le mappe»



«METALLI DELLA TECNOLOGIA»



Terre rare, Rare Earths Norway scopre il giacimento più grande d'Europa



di Fausta Chiesa



Annunciata la scoperta nella contea di Telemark, 150 chilometri a Est di Oslo. Si stima che contenga 8,78 milioni di tonnellate. L'estrazione prevista dopo il 2030

CORRIERE TV

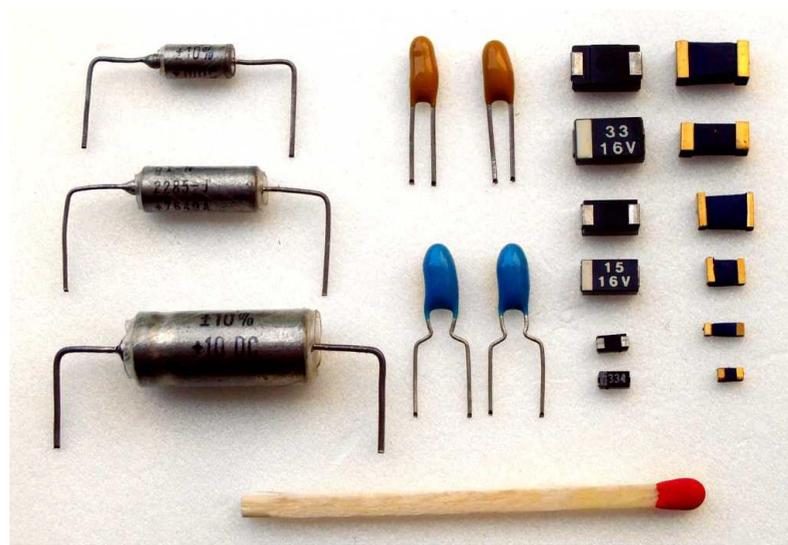


### 3. Gallio, germanio e antimonio: la Cina ce li fa desiderare

(Monica Ricci Sargentini) **Le restrizioni cinesi** all'esportazione di minerali essenziali per la produzione dei **semiconduttori** sta colpendo le catene di

- **Secondo l'US Geological Survey**, la Cina produce **il 98% del gallio e il 60% del germanio** mondiale. Per *Ft* la produzione globale di chip avanzati, cavi in fibra ottica e visori notturni, che richiedono tutti questi due materiali, è minacciata dai controlli sulle esportazioni. «**Dipendiamo da loro**», ha detto al giornale una
- **La Cina ha anche annunciato questo mese** delle restrizioni all'esportazione di **antimonio**, un minerale utilizzato nelle munizioni perforanti e nell'ottica di precisione. La misura ha fatto seguito a rigidi controlli sulle esportazioni di grafite e tecnologie utilizzate nell'estrazione e separazione delle terre rare. **I prezzi del**

# Columbite – Tantalite = **Coltan**



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** (Niobe nella mitologia greca è la figlia del re Tantalo)

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

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

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

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

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

$1 \text{ nm} = 1000 \text{ pm}$ ,  $1 \text{ nm} = 10 \text{ \AA}$ )

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

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

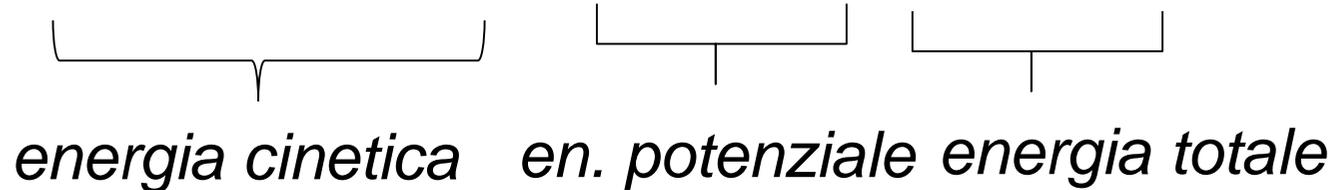
**Heisenberg** (1926): principio di indeterminazione,  
 $\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar/2\pi$  (p = quantità di moto)

**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)

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

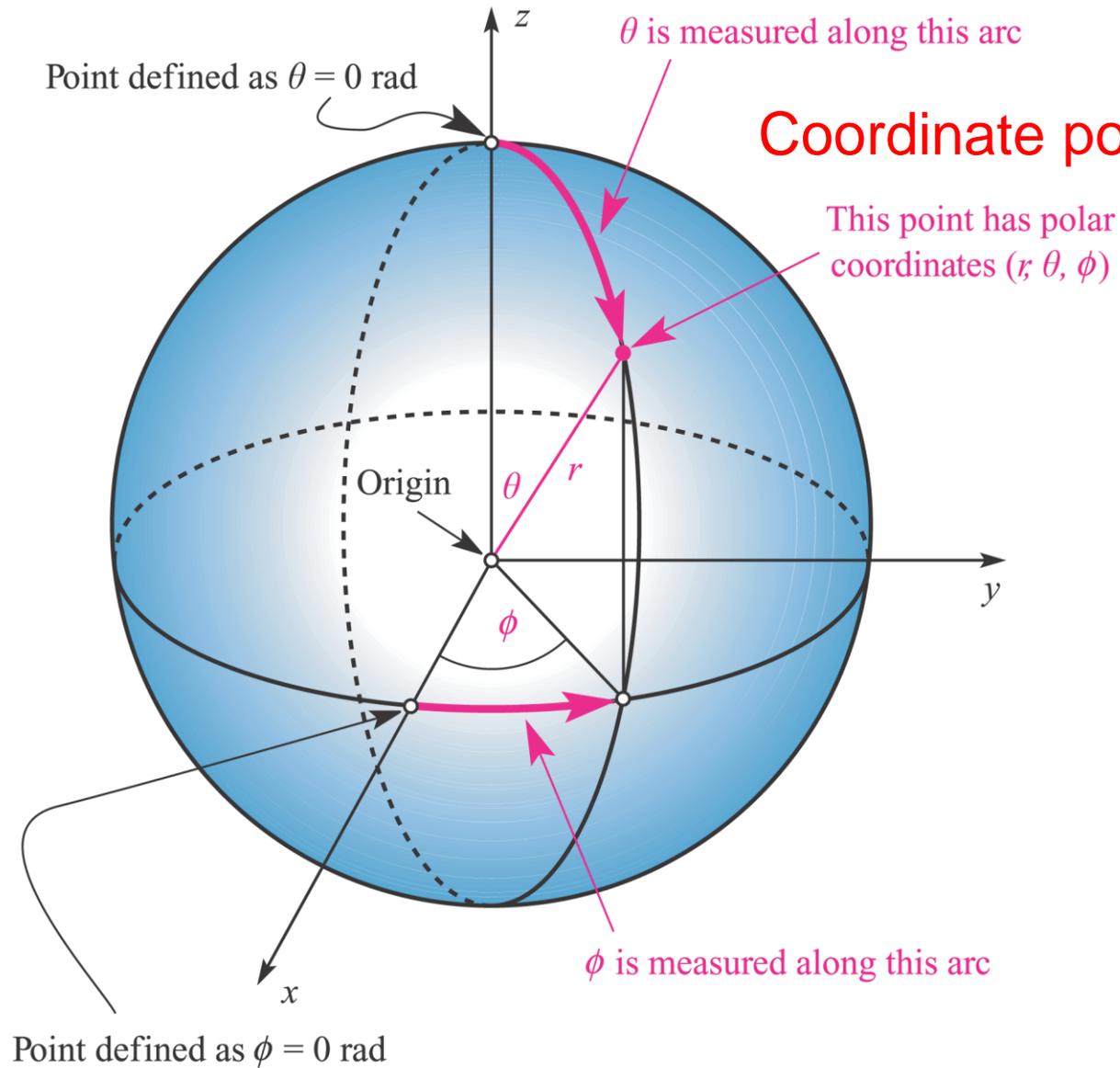
  
*energia cinetica    en. potenziale    energia totale*

$\Psi$  = funzione d'onda

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

Le funzioni d'onda  $\Psi$  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  $\Psi$  sono associati **valori quantizzati di energia E**.



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

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

$n =$  **numero quantico principale**: energia, grandezza (parte radiale di  $\Psi$ ).  
 $n = 1, 2, 3, 4, \dots$  (valori interi)

$l =$  **numero quantico (del momento angolare) orbitale**: forma e momento angolare (parte angolare di  $\Psi$ ).

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

**s, p, d, f, .....** (*s = sharp, p = principal, d = diffuse, f = fundamental*)

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

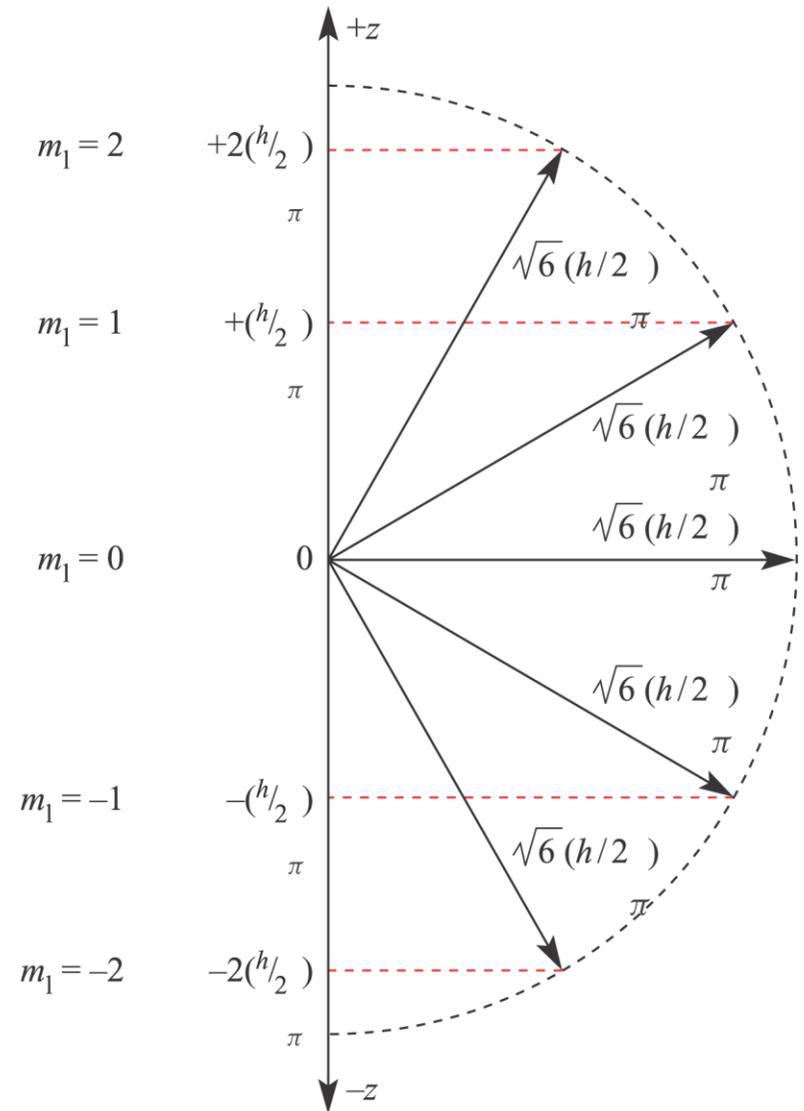
$m_l =$  **numero quantico magnetico**: orientazione del momento angolare (e quindi dell'orbitale stesso) (parte angolare di  $\Psi$ ).

$m_l = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$  (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

# 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  $\frac{h}{2\pi} \times \sqrt{l(l+1)}$



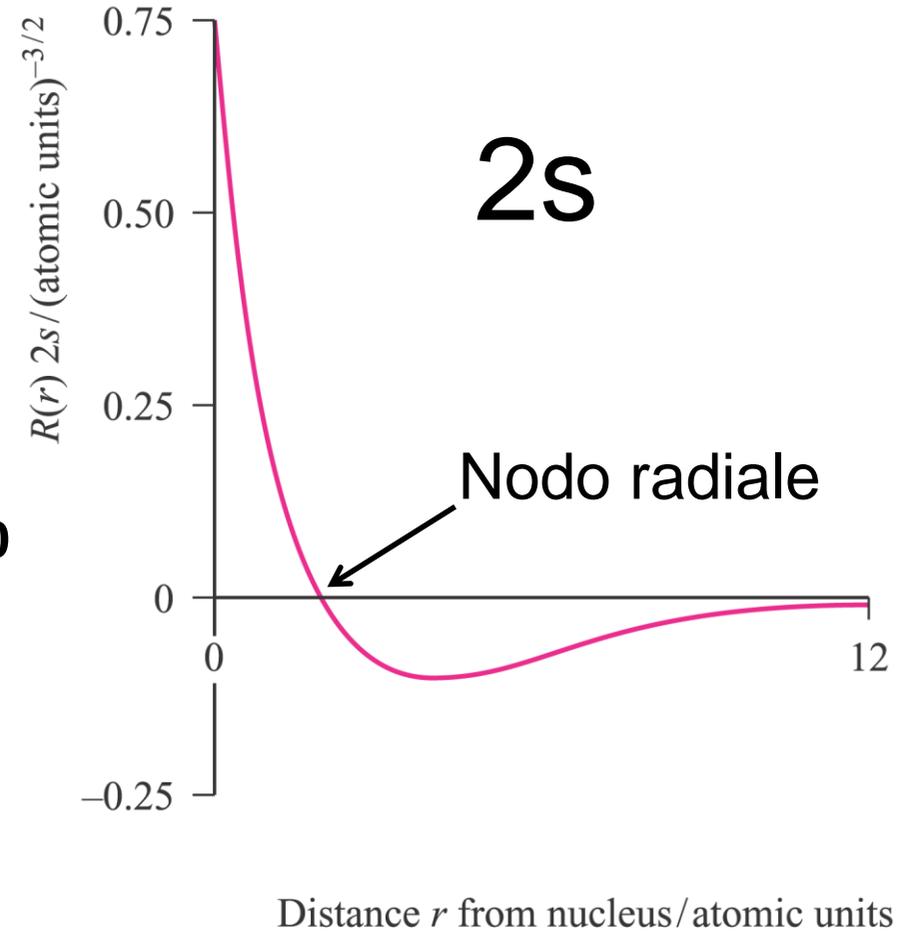
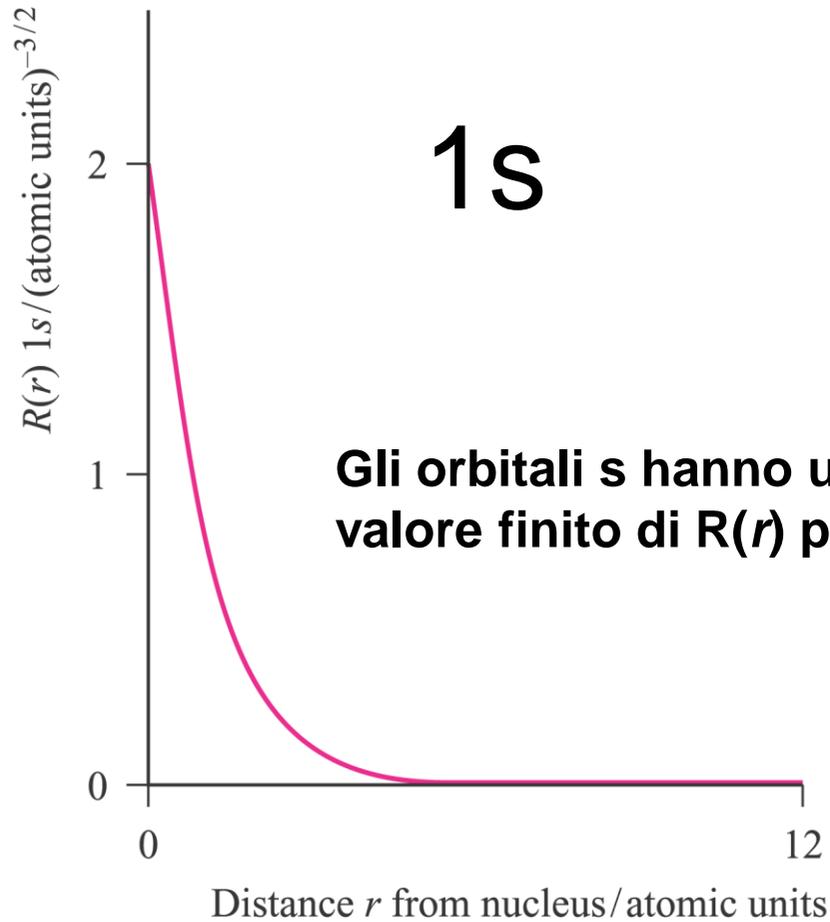
# Funzioni d'onda per l'atomo H

Atomic orbital	$n$	$l$	$m_l$	Radial part of the wavefunction, $R(r)^\dagger$	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 <sub>x</sub>	2	1	+1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}re^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\sin\theta\cos\phi)}{2\sqrt{\pi}}$
2p <sub>z</sub>	2	1	0	$\frac{1}{2\sqrt{6}}re^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\cos\theta)}{2\sqrt{\pi}}$
2p <sub>y</sub>	2	1	-1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}re^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\sin\theta\sin\phi)}{2\sqrt{\pi}}$

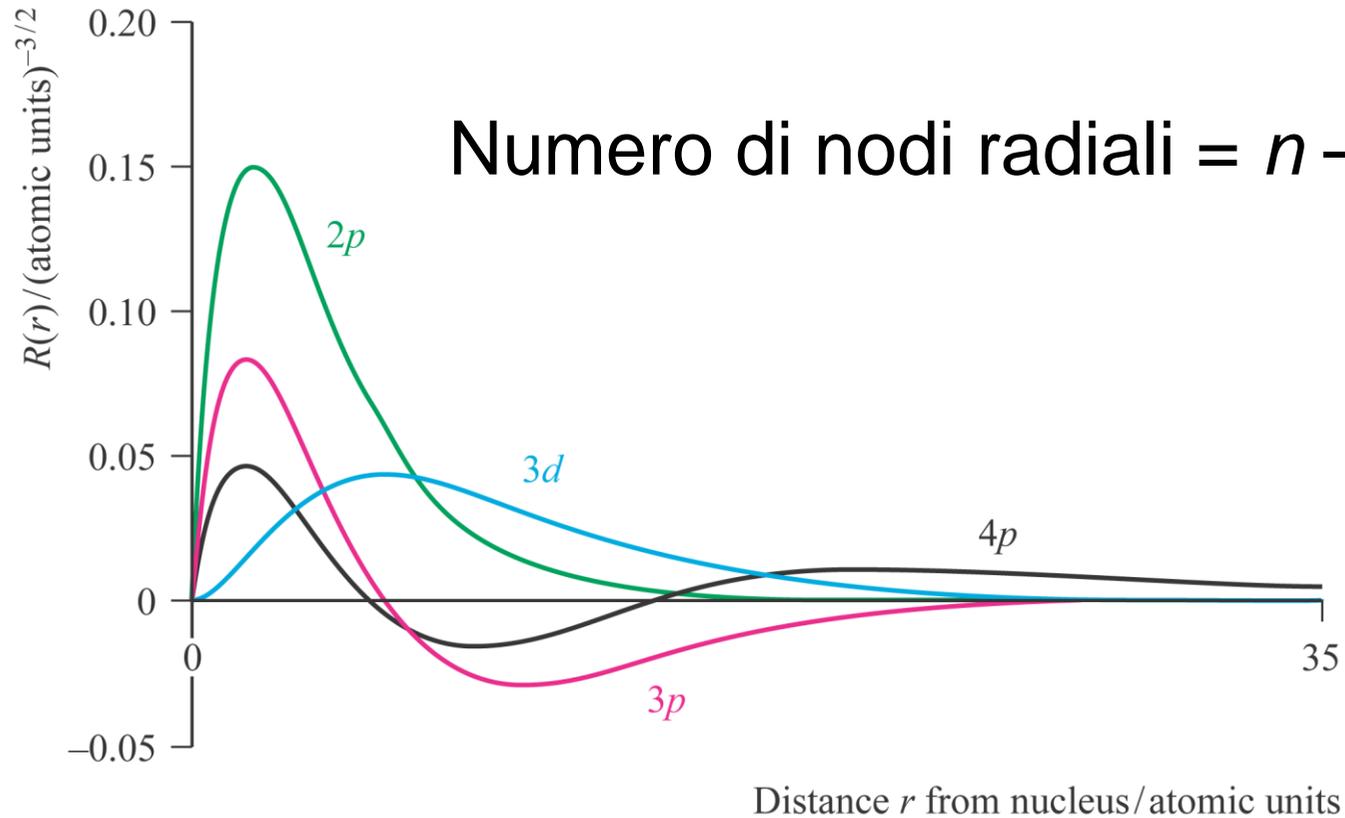
<sup>†</sup> For the 1s atomic orbital, the formula for  $R(r)$  is actually  $2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}e^{-Zr/a_0}$  but for the hydrogen atom,  $Z = 1$  and  $a_0 = 1$  atomic unit. Other functions are similarly simplified.

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

# Componente radiale della funzione d'onda



# Componente radiale della funzione d'onda



- **Gli orbitali s hanno un valore finito di  $R(r)$  per  $r = 0$ , mentre per tutti gli altri  $R = 0$  sul nucleo.**
- Per l'orbitale  $1s$   $R(r)$  è sempre positiva. Per i primi orbitali di altro tipo ( $2p, 3d, 4f, \dots$ )  $R(r)$  è sempre positiva tranne che all'origine, dove è nulla.
- Gli orbitali diversi da  $1s, 2p, 3d$  e  $4f$  hanno **nodi radiali**, cioè punti in cui la funzione cambia segno (il **numero di nodi radiali** è dato da  **$n-l-1$** ).

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

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 <sub>x</sub>	2	1	+1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}re^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\sin\theta\cos\phi)}{2\sqrt{\pi}}$
2p <sub>z</sub>	2	1	0	$\frac{1}{2\sqrt{6}}re^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\cos\theta)}{2\sqrt{\pi}}$
2p <sub>y</sub>	2	1	-1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}re^{-r/2}$	$\frac{\sqrt{3}(\sin\theta\sin\phi)}{2\sqrt{\pi}}$

<sup>†</sup> 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.

$A(\theta, \phi)$  non dipende dal numero quantico principale  $n$

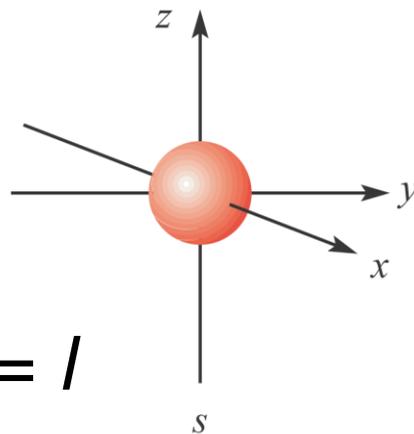
**TABELLA 2.3 Funzioni d'onda dell'atomo di idrogeno: funzioni angolari**

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

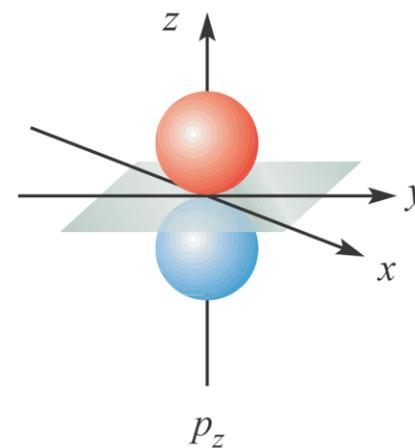
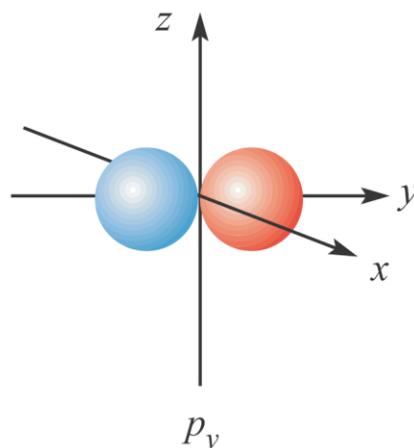
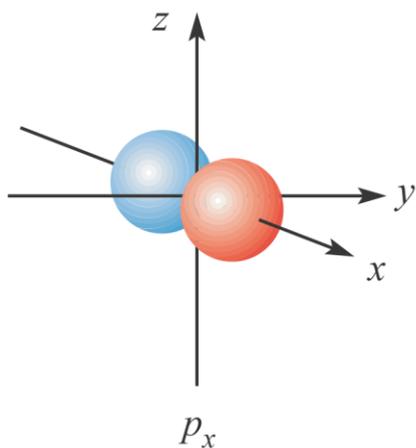
Le combinazioni di solito scelte per alcuni orbitali p e d sono la somma e la differenza dei cosiddetti fattori angolari. Per esempio, i fattori angolari p con  $m_l = +1$  e  $-1$  (funzioni complesse), normalizzati e quindi moltiplicati rispettivamente per le costanti  $1/\sqrt{2}$  e  $i/\sqrt{2}$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

*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*

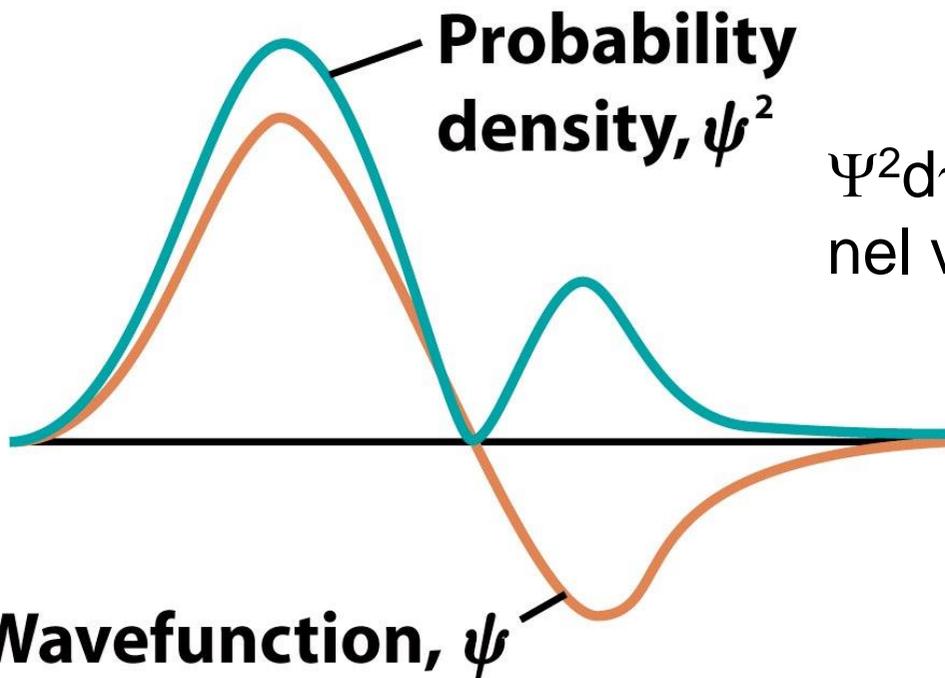
# Superfici di confine senza significato fisico, $A(\theta, \phi)$



Numero di piani nodali =  $l$



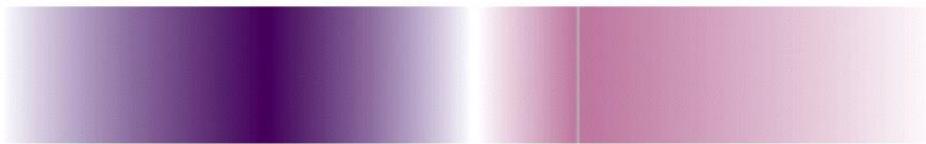
$\Psi^2$  = funzione densità di probabilità



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

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

normalizzazione



**Probability density**

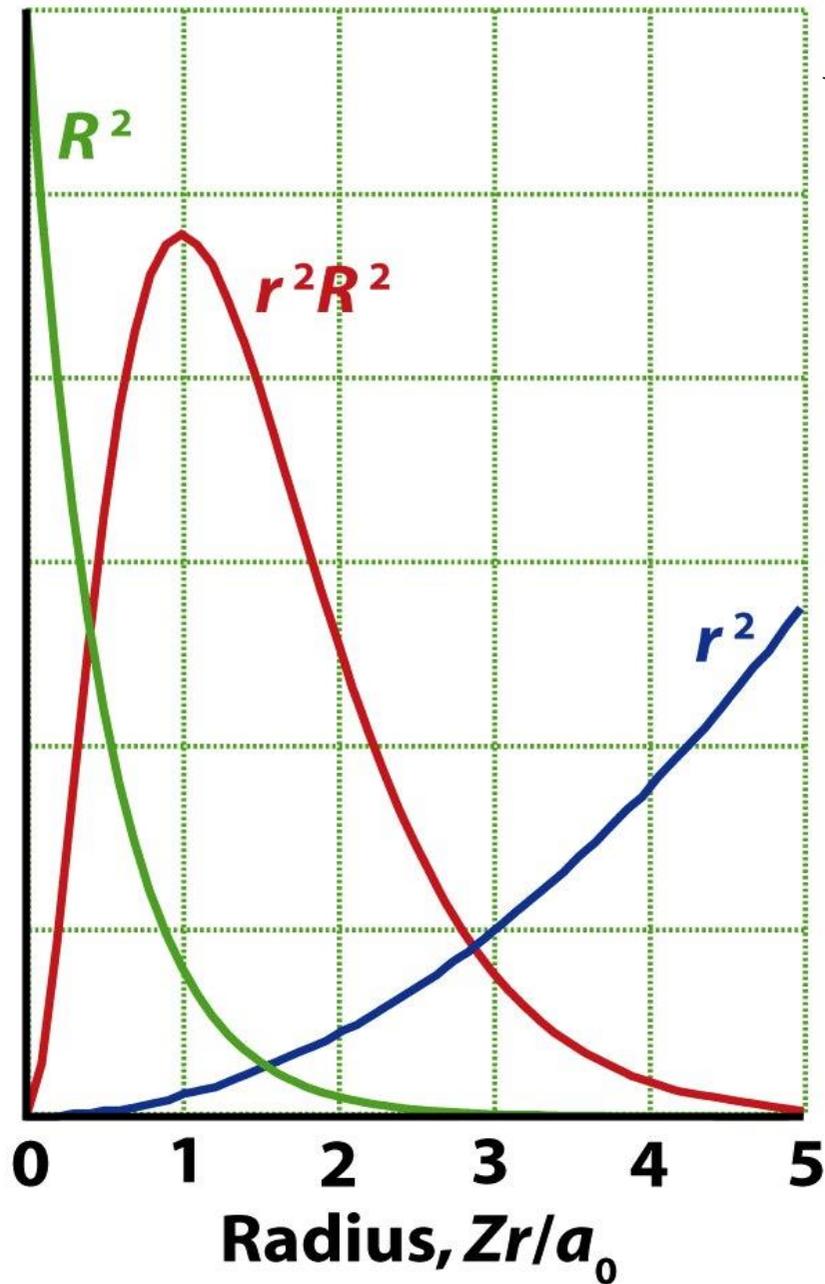
$$\Psi^2(x, y, z) = R_{n,l}(r)^2 \cdot A_{l,m}(\theta, \phi)^2$$

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

**funzione di  
distribuzione radiale**

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

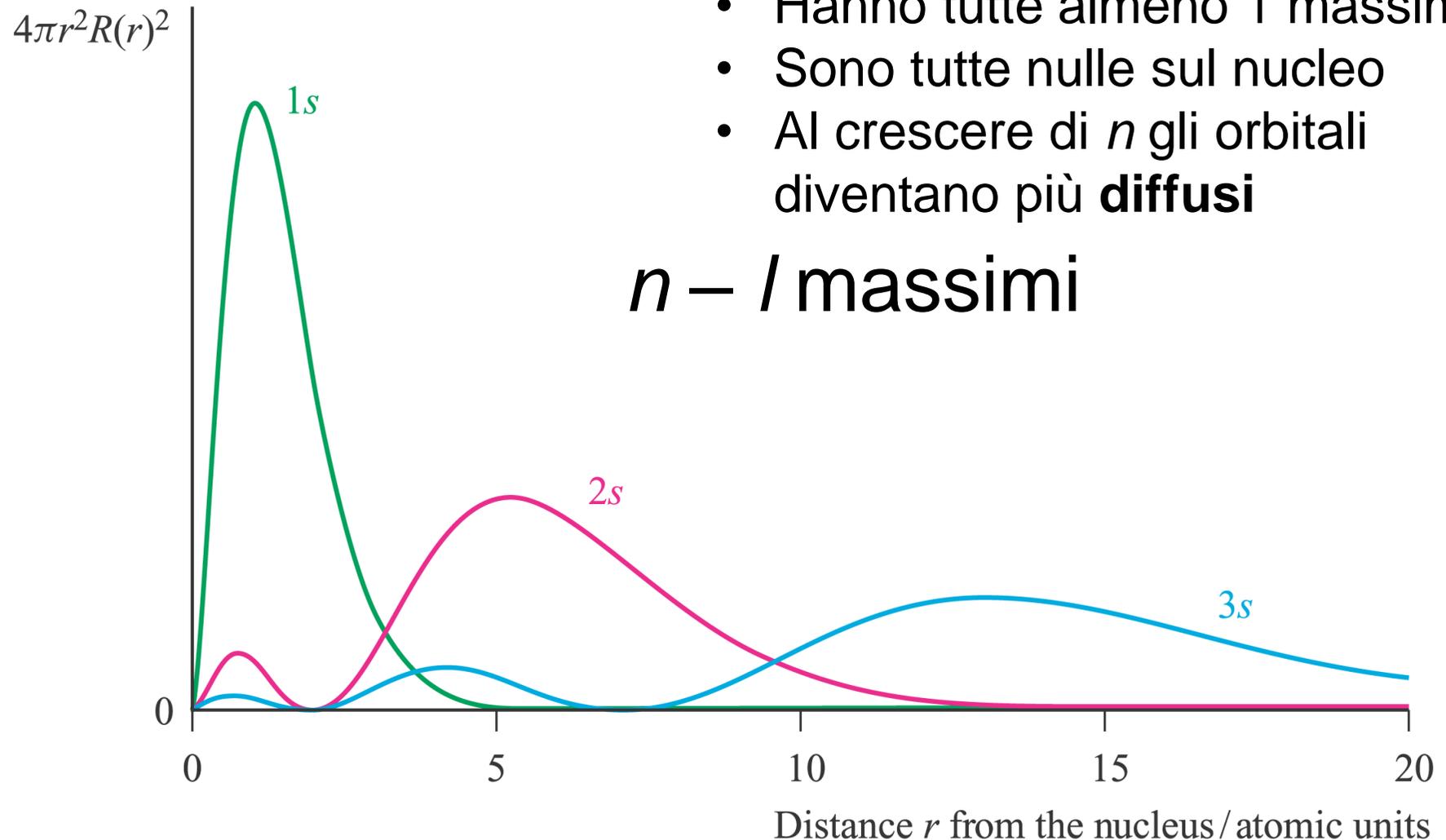
probabilità di trovare l'elettrone a una distanza  $r$  dal nucleo (in un guscio sferico di superficie  $4\pi r^2$  e di spessore  $dr$ ), indipendentemente dalla direzione. È l'integrale di  $\Psi^2 dr$  esteso su tutti gli angoli



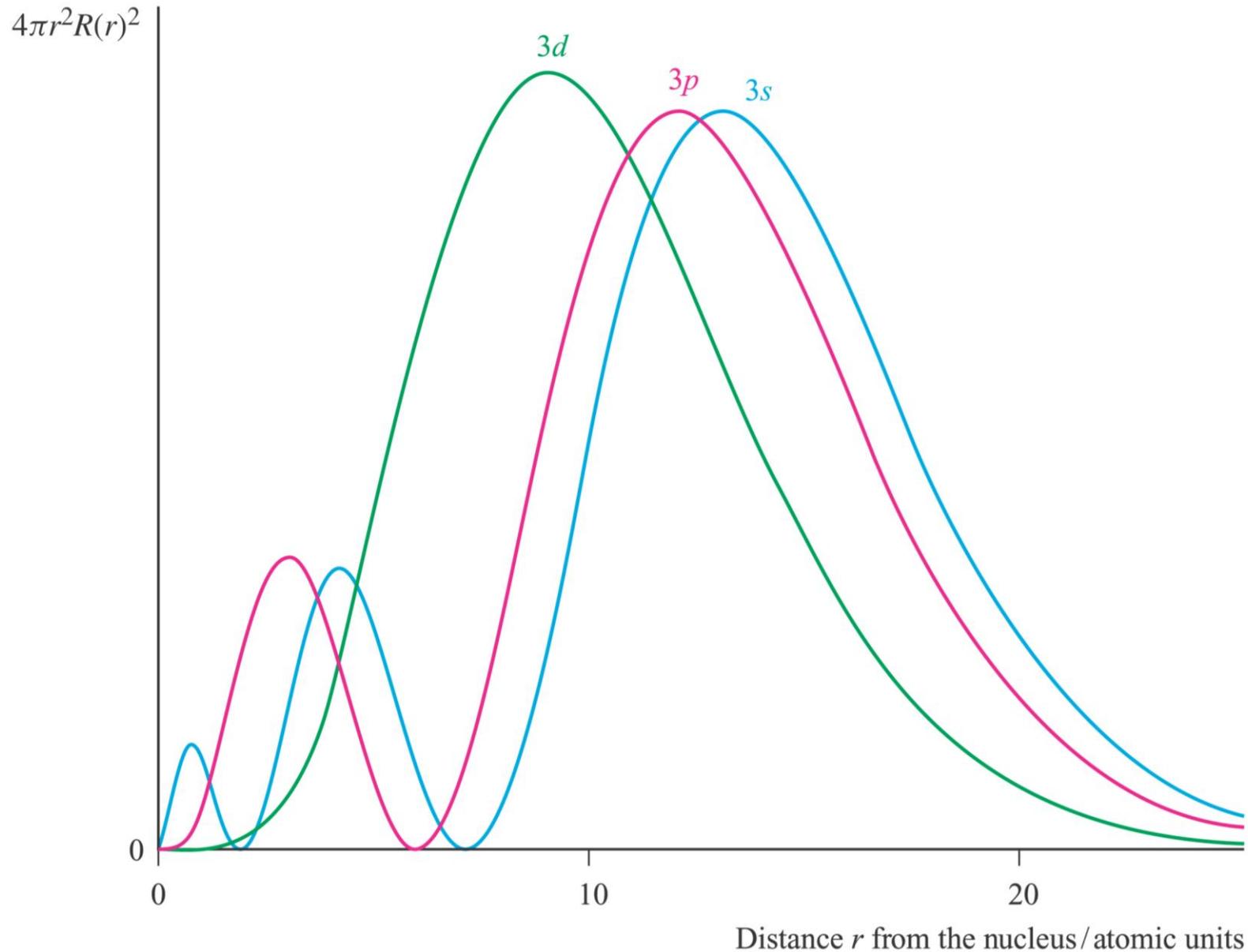
**Orbitale 1s**

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

# Funzioni di distribuzione radiale

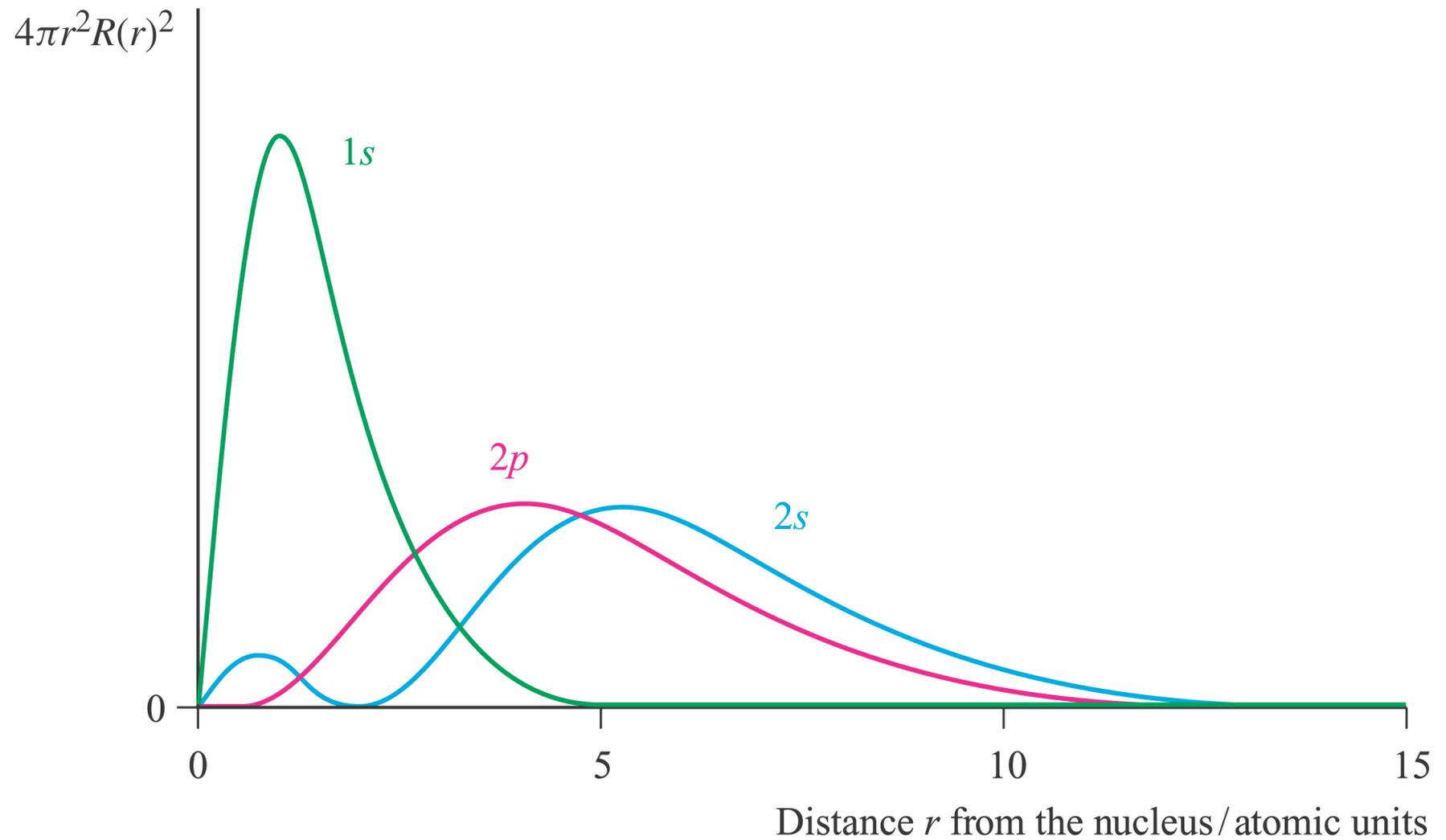


# Funzioni di distribuzione radiale

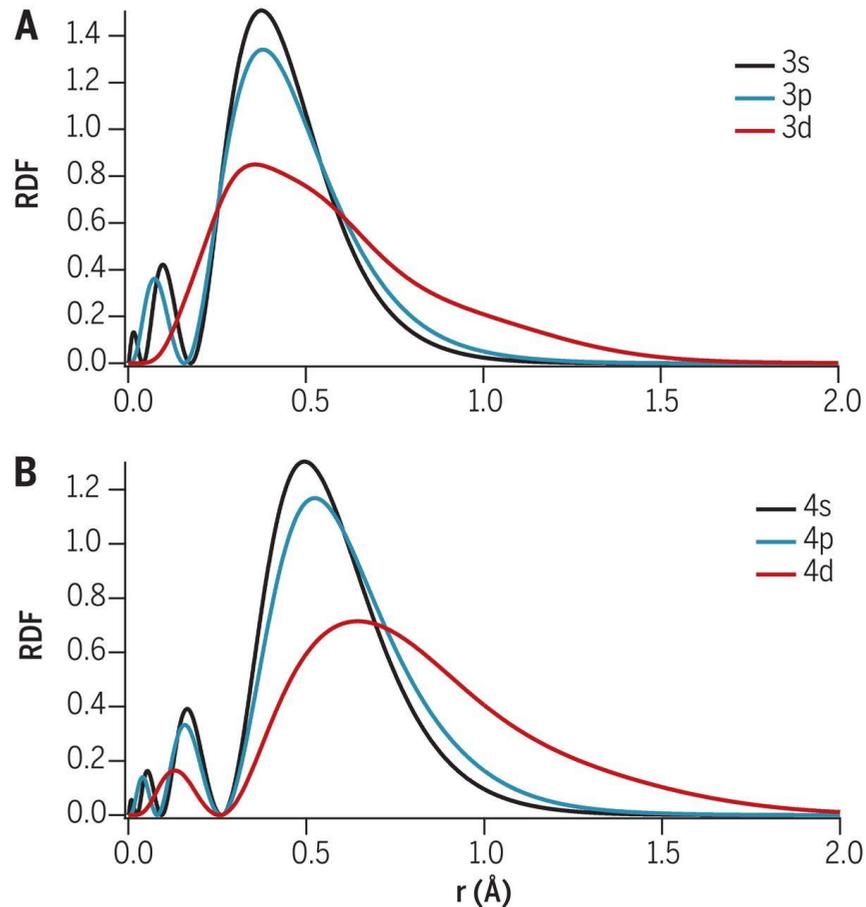


A parità di  $n$ , orbitali con  $l$  più piccolo sono più **penetranti**

# Funzioni di distribuzione radiale



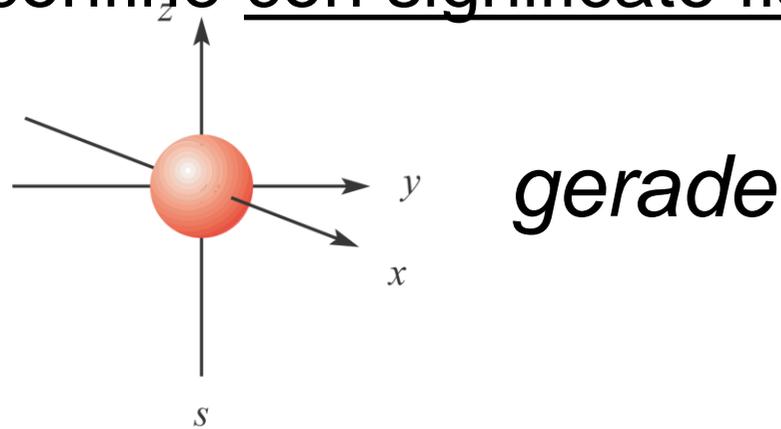
# *primogenetic effect*



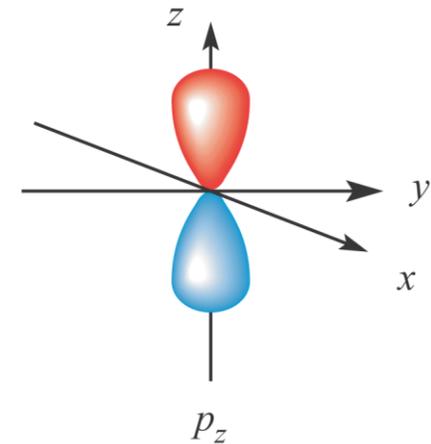
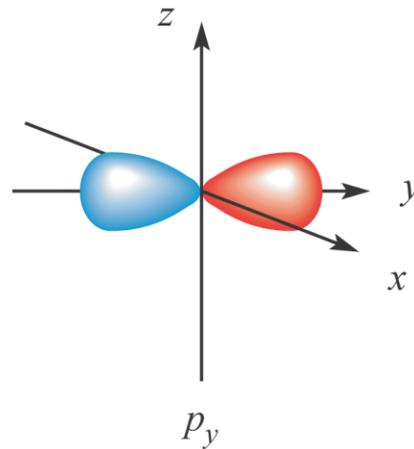
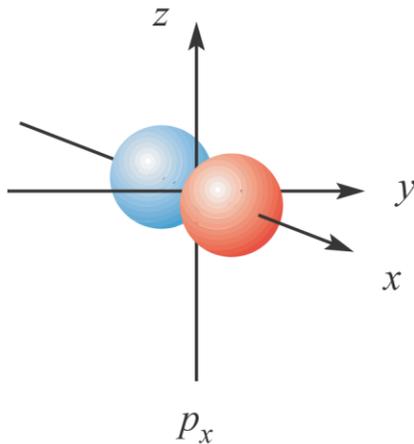
La contrazione degli orbitali 3d si verifica a causa di un'inefficiente schermatura della carica nucleare da parte degli elettroni interni (di *core*), un effetto che è causato in gran parte dall'assenza di un nodo radiale per la funzione d'onda  $n = 3$ ,  $l = 2$ .

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

## Superfici di confine con significato fisico

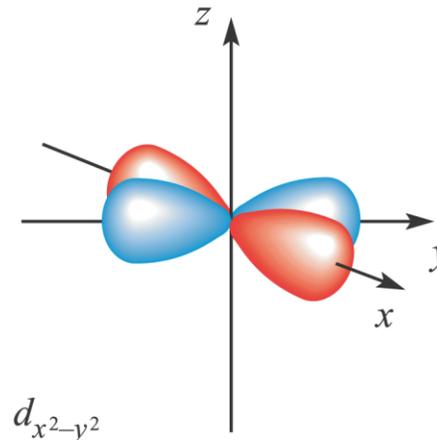
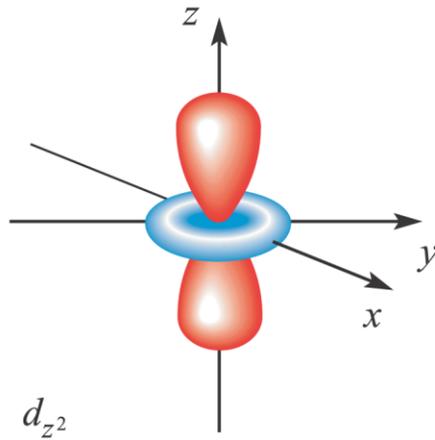
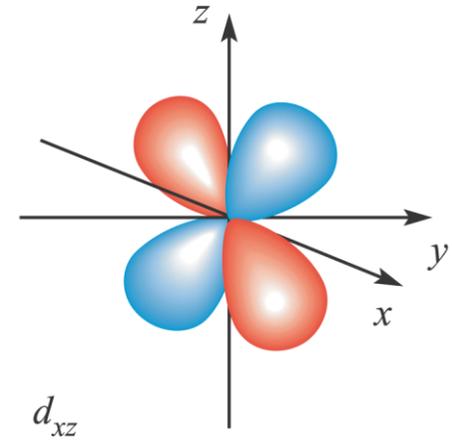
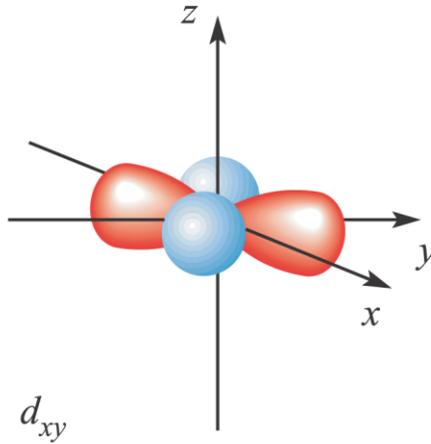
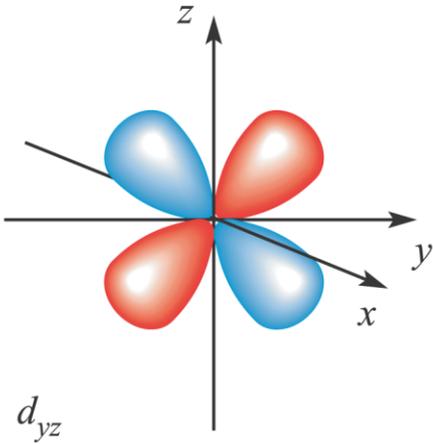


*ungerade*



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

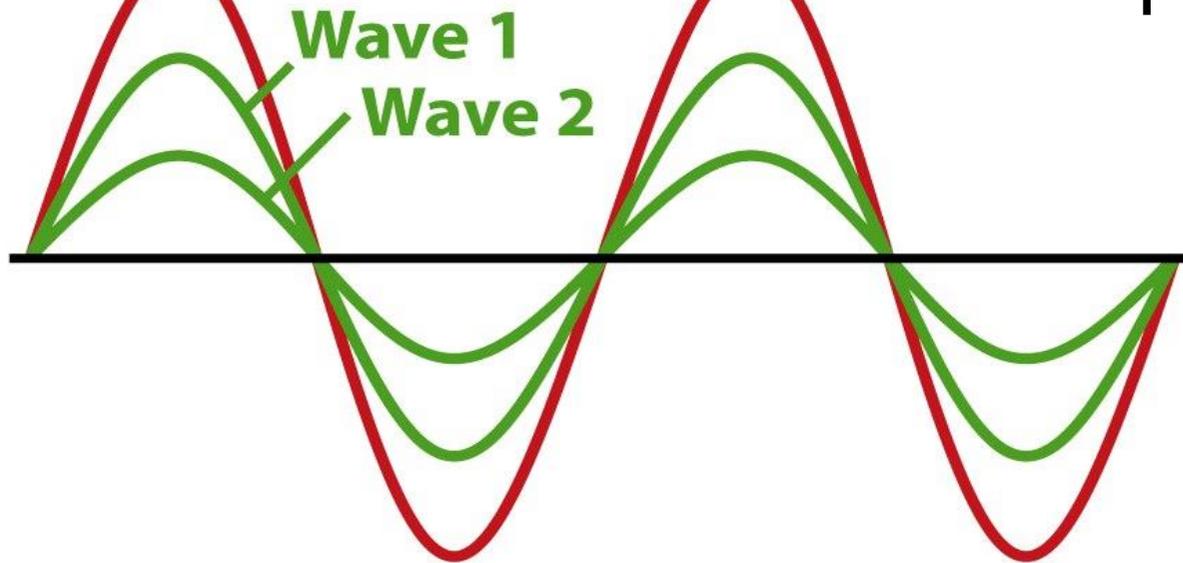
# Superfici di confine con significato fisico, $A(\theta, \phi)^2$



*gerade*

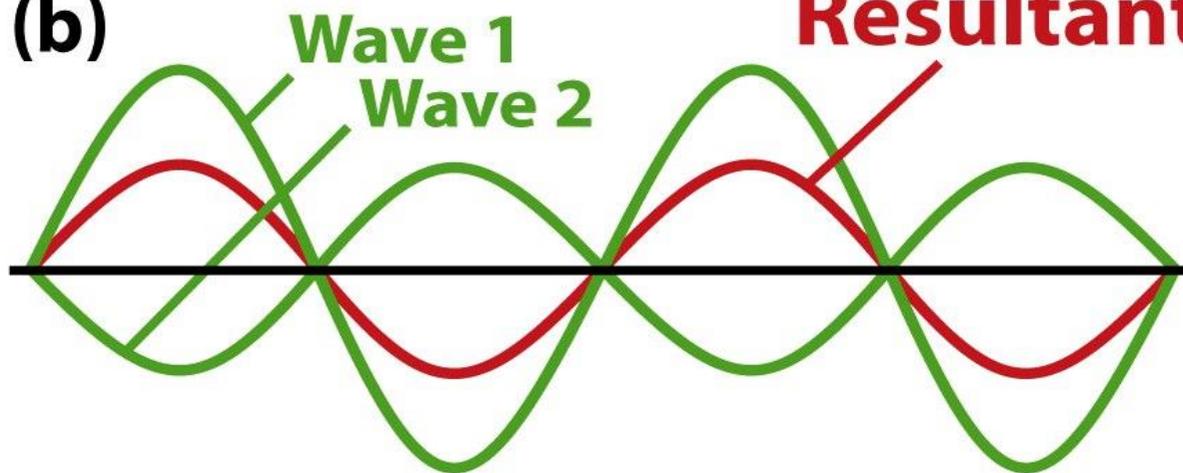
**(a) Resultant**

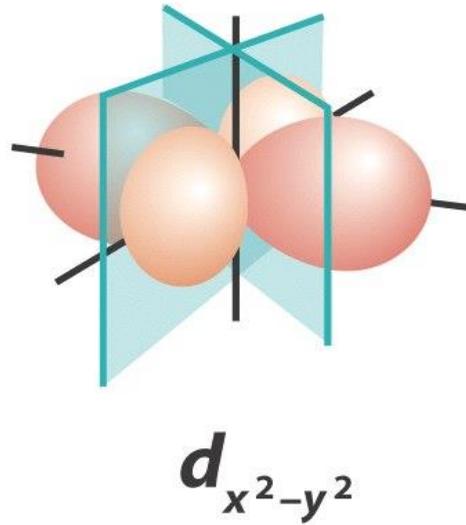
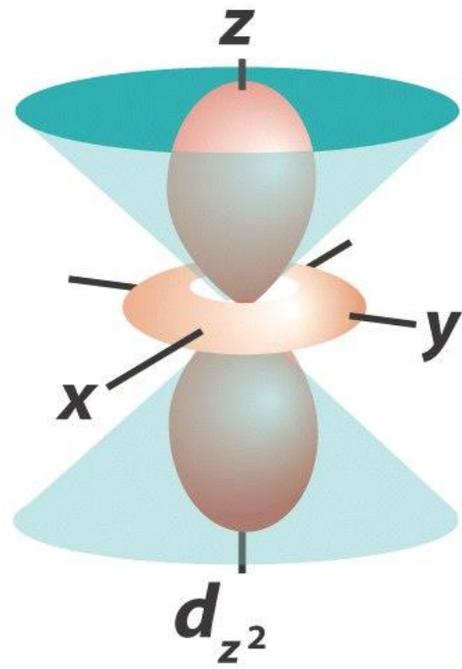
Importanza della fase



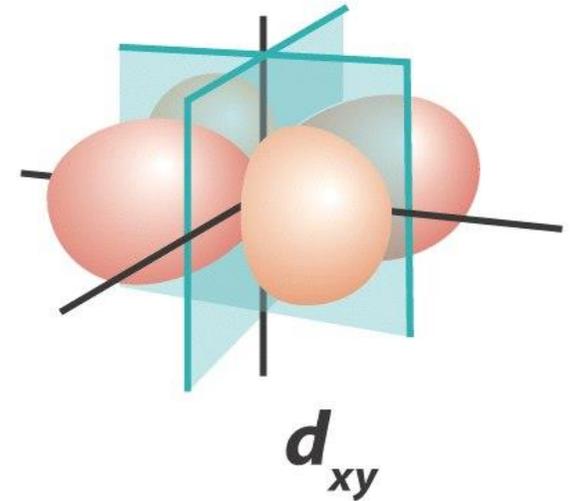
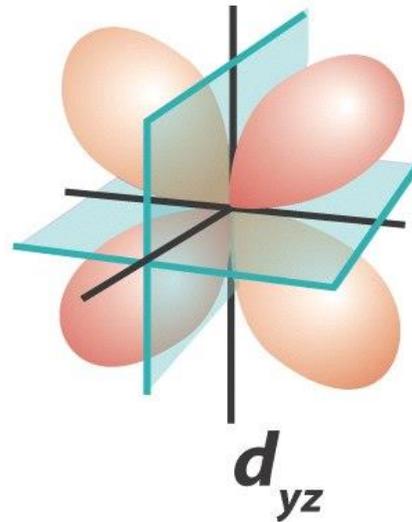
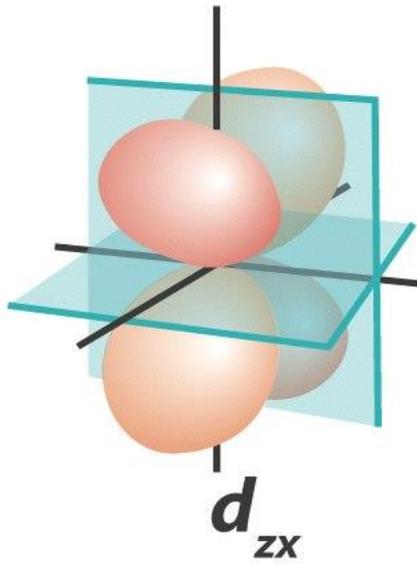
**(b)**

**Resultant**



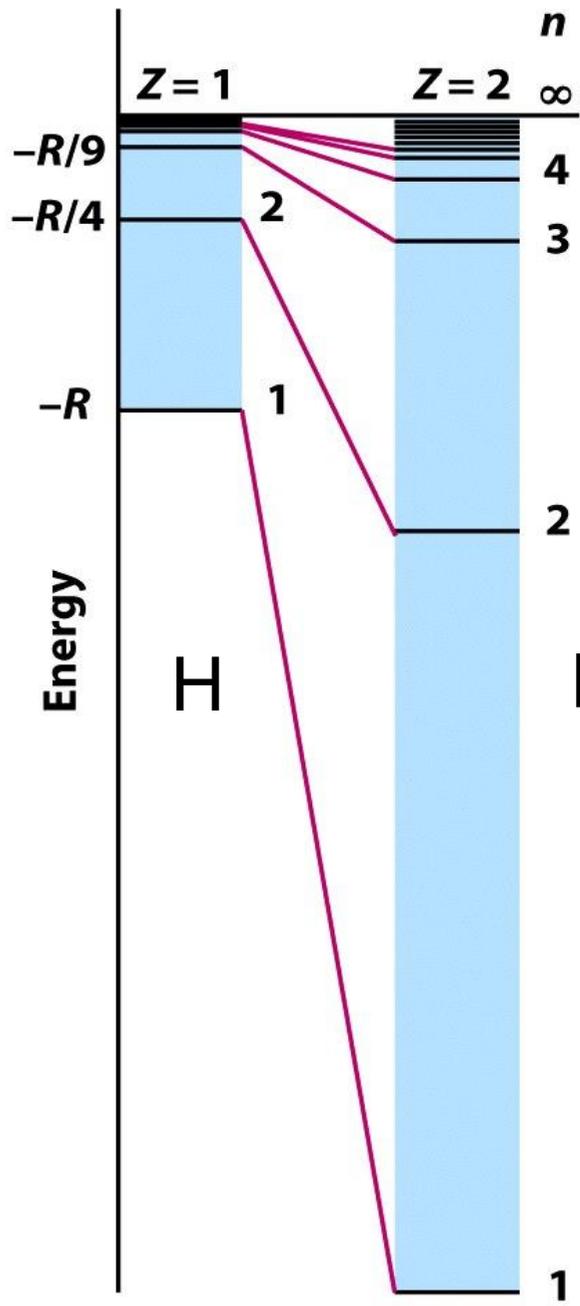


Le funzioni di distribuzione angolare hanno / piani nodali



eccellenti rappresentazioni degli orbitali si  
possono trovare sul sito:

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



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

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

H

He<sup>+</sup>

# Subshells

