

CORSO DI FONDAMENTI DI CHIMICA INORGANICA A.A. 2020/2021

PROGRAMMA DETTAGLIATO

DOCENTE: DOTT.SSA SANDRA BELVISO

Origine degli elementi. Struttura atomica.

Atomo di idrogeno. Equazione di Schrödinger. Funzione di probabilità di distribuzione radiale. Numeri quantici. Orbitali atomici. Energie degli orbitali. Effetti di penetrazione e di schermo. Orbitali di Slater.

Classificazione degli elementi in base alla configurazione elettronica di valenza. Metalli, non metalli, metalloidi. Proprietà di conducibilità elettrica degli elementi.

Definizioni di raggio atomico al variare della natura degli elementi. Andamenti e variazioni nella tavola periodica nel caso degli elementi dei gruppi principali.

Raggi ionici. Definizioni e variazioni nella tavola periodica. Anioni e cationi. Fattori che ne influenzano le dimensioni.

Proprietà periodiche. Potenziali di ionizzazione. Affinità elettronica. Elettronegatività. Definizioni e variazioni nella tavola periodica nel caso degli elementi dei gruppi principali.

Stati di ossidazione degli elementi principali. Effetti relativistici. Effetto della coppia inerte.

Interazioni tra i momenti angolari orbitali e di spin degli elettroni nelle configurazioni degli atomi. Accoppiamento Russell-Saunders ed effetto dell'accoppiamento spin-orbita. Microstati e Termini nel caso dell'atomo di carbonio e nel caso di un metallo di transizione di configurazione d^2 .

Acidi e Basi. Concetto di Brønsted & Lowry. Reazioni in solventi non acquosi. Acidità di acidi alogenidrici. Concetto di Lewis. Concetti di donatore ed accettore. Addotti acido-base. Teoria delle acidi e delle basi duri e molli.

Strutture solide cristalline. Reticoli di Bravais. Reticoli solidi ionici. Energetica di un solido ionico: Ciclo di Born-Haber per la misura dell'entalpia reticolare. Calcolo dell'energia reticolare: Modello classico elettrostatico. Equazione di Born-Landé. Costante di Madelung. Equazione di Kapustinskii. Solubilità dei solidi ionici: ruolo dell'entalpia reticolare, dell'entalpia di solvatazione, della dimensione degli ioni e dei contributi entropici.

Caratteristiche periodiche dei composti: andamenti delle lunghezze e delle energie di legame dei molecole biatomiche omo- ed etero nucleari. Triangolo di van Arkel-Ketelaar.

Idrogeno ed idruri. Idruri salini, molecolari, metallici. Strutture, proprietà, reattività.

Strutture e proprietà degli ossidi. Ossidi ionici, covalenti e a reticolo covalente (polimerici). Carattere basico, acido ed anfotero.

Proprietà degli alogeni. Strutture e proprietà degli alogenuri. Alogenuri ionici, covalenti e a reticolo covalente (polimerici). Composti interalogeno.

Introduzione ai composti di coordinazione.

Definizioni. Sfera di coordinazione. Tipo di leganti. Aspetti strutturali. Geometria. Isomeria costituzionale e stereoisomeria. Nomenclatura dei composti di coordinazione.

Regole. Definizioni. Suffissi e prefissi. Esempi.

Elementi del blocco d: *metalli di transizione*. Configurazioni elettroniche. Proprietà periodiche. Andamenti e variazioni di raggi atomici, potenziali di ionizzazione, stati di ossidazione.

Il legame chimico nei composti dei metalli di transizione.

Teoria del Campo Cristallino (CFT).

Modello MO-LCAO - Caso geometria ottaedrica. Influenza sul Delta Ottaedrico della natura e della carica del metallo. Influenza dei leganti σ donatori, π donatori, π^* accettori. Serie spettrochimica.

Modello MO-LCAO - Casi geometria tetraedrica e geometria quadrato planare.

Modello della sovrapposizione angolare (AOM).

Correlazione della configurazione elettronica d^n dello ione metallico con la geometria e la simmetria del composto di coordinazione. Stati ad alto spin e a basso spin. Preferenze strutturali. Distorsioni della geometria: teorema di Jahn-Teller.

Principali tipi e meccanismi di reazione dei complessi dei metalli di transizione. Reazioni di sostituzione di leganti in complessi a geometria ottaedrica. Reazioni di sostituzione di molecole di acqua. Reazioni di anazione e di idrolisi. Influenza del metallo. Influenza dello ione metallico e dei leganti. Effetti sterici.

Reazioni di sostituzione di complessi a geometria quadrato-planare. Influenza del gruppo entrante e del gruppo uscente. Leganti in posizione *trans* e *cis* al gruppo uscente. Influenza del metallo.

Reazioni di trasferimento elettronico: meccanismi a sfera esterna ed a sfera interna.

TESTI DI RIFERIMENTO E DI APPROFONDIMENTO

- Purcell, K. F.; Kotz, J. C., *Inorganic Chemistry* - Holt-Saunders International Editions
- Miessler G. L.; Tarr, D. A., *Inorganic Chemistry*, Forth Edition – Pearson Prentice Hall, 2011

(Edizione Italiana: Miessler G. L.; Tarr, D. A, *Chimica Inorganica* - Piccin, 2012)

- Weller et.al., *Inorganic Chemistry*, Sixth Edition - Oxford University Press, 2014
- Atkins P.et al., *Inorganic Chemistry*, Fifth Edition - Oxford University Press, 2010
- Housecroft, C. E., Sharpe, A. G., *Inorganic Chemistry*, Third Edition - Pearson Prentice Hall, 2008