

La tavola periodica degli elementi ritrovata nell'università di St. Andrews, in Scozia: risale al 1879-1886

Periodische Gesetzmässigkeit der Elemente nach Mendeleieff

Reihen	Gruppe I $R^2 O$	Gruppe II RO	Gruppe III $R^2 O^3$	Gruppe IV RH^4 RO^2	Gruppe V RH^3 $R^2 O^5$	Gruppe VI RH^2 RO^3	Gruppe VII RH $R^2 O^7$	Gruppe VIII RO^4
1	H=1							
2	Li=7	Be=9,4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	Na=23	Mg=24	Al=27,3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4	K=39	Ca=40	Sc=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fe=56, Co=59
5	(Cu=63)	Zn=65	Ga=68	--72	As=75	Se=79	Br=80	Ni=59, Cu=63
6	Rb=85	Sr=87	Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	--100	Ru=104, Rh=104 Pd=106, Ag=108



Elementi, Watson!

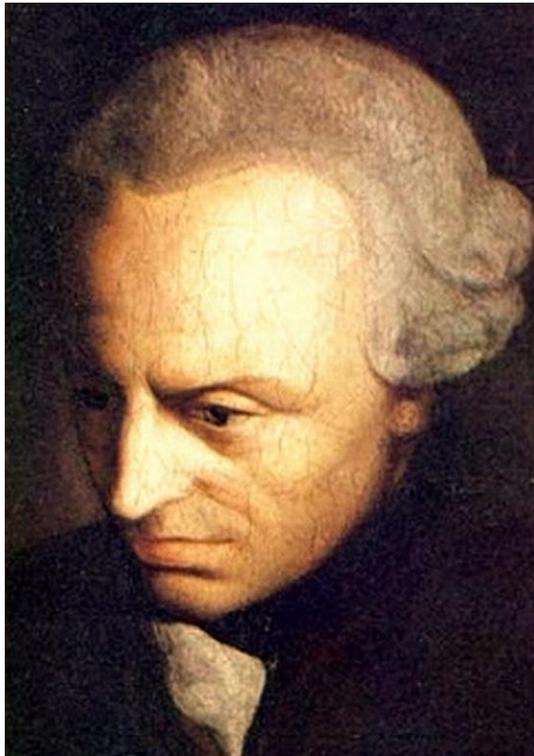


Roberto Todeschini

Milano Chemometrics and QSAR Research Group
Dipartimento di Scienze dell'Ambiente e della Terra
Università di Milano-Bicocca

Immanuel Kant (Königsberg, 1724 – 1804)

«La chimica non potrà diventare nulla più che arte sistematica o dottrina sperimentale, ma mai una scienza nel senso proprio della parola, poiché i suoi principi sono soltanto empirici, e non permettono nessuna rappresentazione a priori nell'intuizione, e di conseguenza non rendono minimamente comprensibili i fondamenti dei fenomeni chimici secondo la loro possibilità, perché incapaci dell'applicazione della matematica.»



**Primi principi metafisici della scienza
della natura - 1786**

Antoine-Laurent de Lavoisier (Parigi, 1743 – Parigi, 1794)



Con Lavoisier nasce la chimica moderna.
Demolisce definitivamente la teoria del flogisto e con i suoi studi ...

- La legge di conservazione della massa
- Spiega i processi di combustione
- Ridefinisce la nomenclatura degli atomi
-

Antoine Laurent de Lavoisier (Parigi, 1743 – Parigi, 1794)

Lista degli elementi di Lavoisier (1789)



33

192 DES SUBSTANCES SIMPLES.
TABLEAU DES SUBSTANCES SIMPLES.

	Noms nouveaux.	Noms anciens correspondans.
<i>Substances simples qui appartiennent aux trois règnes & qu'on peut regarder comme les élémens des corps.</i>	Lumière.....	Lumière. Chaleur. Principe de la chaleur.
	Calorique.....	Fluide igné. Feu.
	Oxygène.....	Matière du feu & de la chaleur. Air déphlogistiqué. Air empiréal. Air vital. Bâse de l'air vital. Gaz phlogistiqué.
	Azote.....	Mofere. Bâse de la mofere. Gaz inflammable.
<i>Substances simples non métalliques oxidables & acidifiables.</i>	Hydrogène.....	Bâse du gaz inflammable.
	Soufre.....	Soufre.
	Phosphore.....	Phosphore.
	Carbone.....	Charbon pur.
	Radical muriatique.	Inconnu.
	Radical fluorique..	Inconnu.
	Radical boracique..	Inconnu.
	Antimoine.....	Antimoine.
	Argent.....	Argent.
	Arsenic.....	Arsenic.
Bismuth.....	Bismuth.	
Cobalt.....	Cobalt.	
Cuivre.....	Cuivre.	
<i>Substances simples métalliques oxidables & acidifiables.</i>	Étain.....	Étain.
	Fer.....	Fer.
	Manganèse.....	Manganèse.
	Mercure.....	Mercure.
	Molybdène.....	Molybdène.
	Nickel.....	Nickel.
	Or.....	Or.
	Platine.....	Platine.
	Plomb.....	Plomb.
	Tungstène.....	Tungstène.
Zinc.....	Zinc.	
<i>Substances simples salifiables terreuses.</i>	Chaux.....	Terre calcaire, chaux.
	Magnésie.....	Magnésie, bâse du sel d'Épſom.
	Baryte.....	Barote, terre pesante.
	Alumine.....	Argile, terre de l'alun, bâse de l'alun.
	Silice.....	Terre ſiliceuſe, terre vitrifiable.

La massa atomica (ovvero il peso atomico)

I primi scienziati a determinare le masse atomiche relative furono **John Dalton** e **Thomas Thomson** tra il 1803 e il 1805 e **Jöns Jakob Berzelius** tra il 1808 e il 1826.

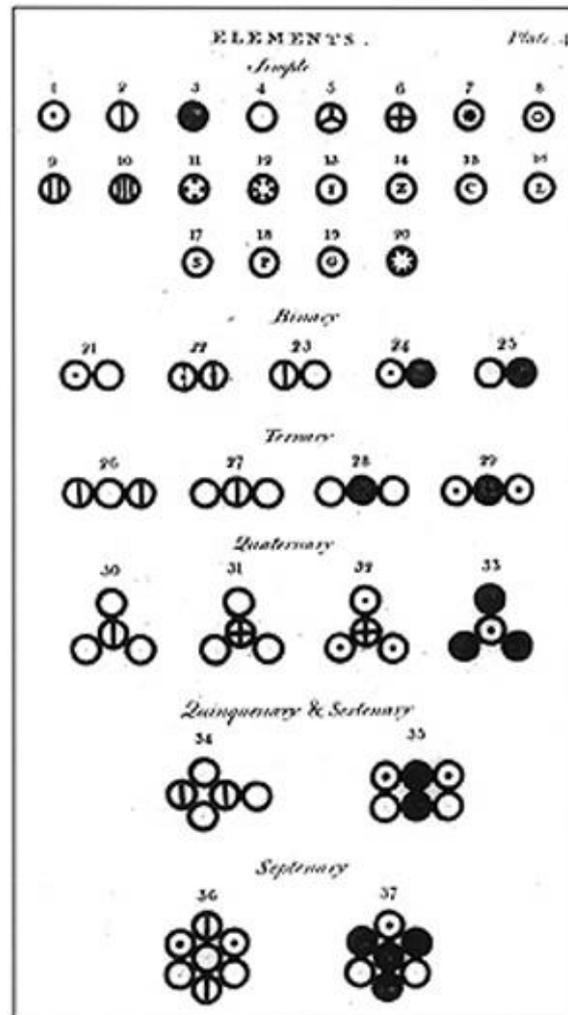


Prima matematizzazione della chimica

John Dalton (Eaglesfield, 1766 – Manchester, 1844)



Una rappresentazione degli elementi di John Dalton ("A New System of Chemical Philosophy", **1808**).



Lorenzo Romano Amedeo Carlo Avogadro (Torino, 1776 – 1856)



Il numero di Avogadro (1811)

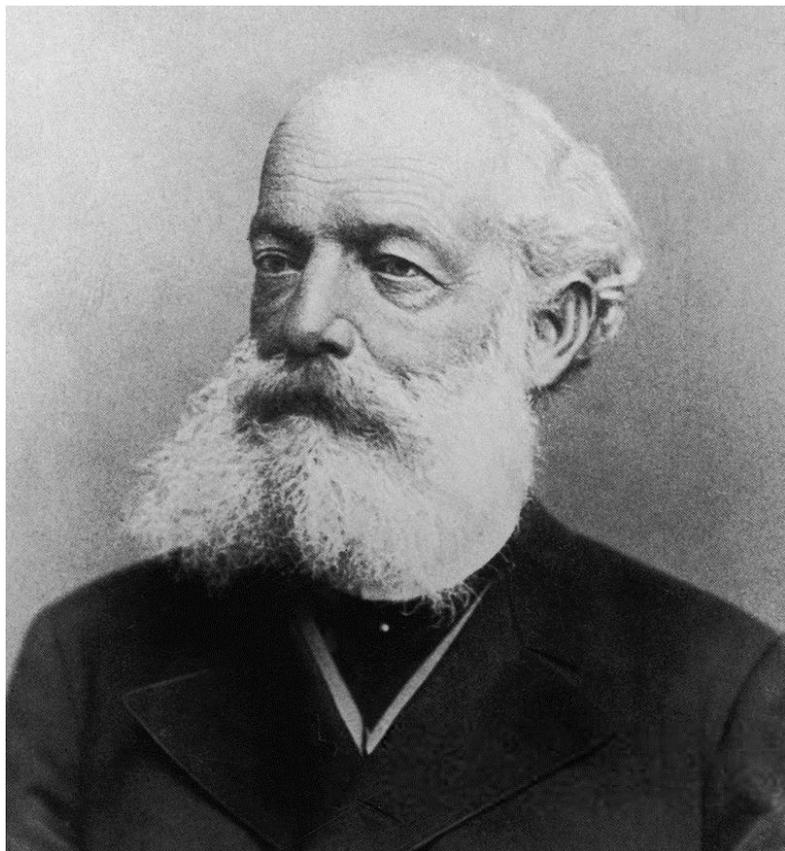
Il numero di atomi, molecole, particelle contenute in una mole di sostanza

$$6,022 \times 10^{23}$$



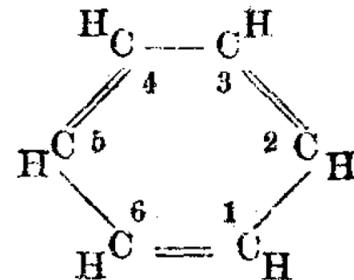
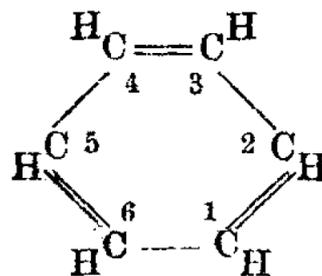
**Seconda matematizzazione
della chimica**

Friedrich August Kekulé von Stradonitz (Darmstadt, 1829 – Bonn, 1896)



Kekulé, nel 1858, osservò come gli atomi di carbonio si legavano frequentemente allo stesso numero di altri atomi

... e sviluppa quindi il concetto di valenza



Ebenezer Cobham Brewer (Norwich, 1810 – Edwinstowe, 1897)

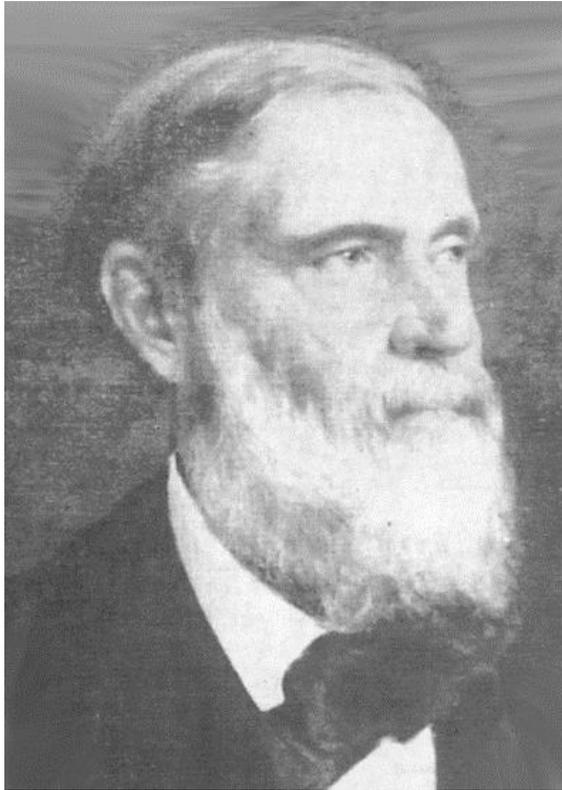


**La chiave della scienza
1856**

62 elementi

Stanislao Cannizzaro (Palermo, 1826 – Roma, 1910)

La Scuola di Palermo

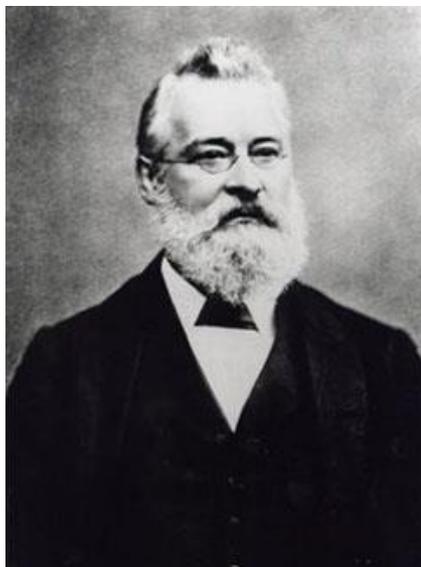


L'ipotesi di **molecole** come **aggregati poliatomici** nasce da Avogadro e Ampère nella prima metà dell'800, ma questa ipotesi non riscuote nella comunità scientifica alcun un interesse.

Cannizzaro sviluppa l'idea che le particelle delle varie sostanze chimiche siano costituite da più atomi elementari (1858), in un contesto teorico/sperimentale in grado ora di coglierne l'importanza.

Karlsruhe, 1860

John Alexander Reina Newlands (Londra, 1838 – Londra, 1898)



Una tavola periodica di Newlands presentata alla Chemical Society nel **1865**, basata sulla **legge delle ottave**.

62 elementi

No.	No.	No.	No.	No.	No.	No.	No.	No.
H 1	F 8	Cl 15	Co & Ni 22	Br 29	Pd 36	I 42	Pt & Ir 50	
Li 2	Na 9	K 16	Cu 23	Rb 30	Ag 37	Cs 44	Os 51	
G 3	Mg 10	Ca 17	Zn 24	Sr 31	Cd 38	Ba & V 45	Hg 52	
Bo 4	Al 11	Cr 19	Y 25	Ce & La 33	U 40	Ta 46	Tl 53	
C 5	Si 12	Ti 18	In 26	Zr 32	Sn 39	W 47	Pb 54	
N 6	P 13	Mn 20	As 27	Di & Mo 34	Sb 41	Nb 48	Bi 55	
O 7	S 14	Fe 21	Se 28	Ro & Ru 35	Te 43	Au 49	Th 56	

Julius Lothar Meyer (Varel, 1830 – Tubinga, 1895)

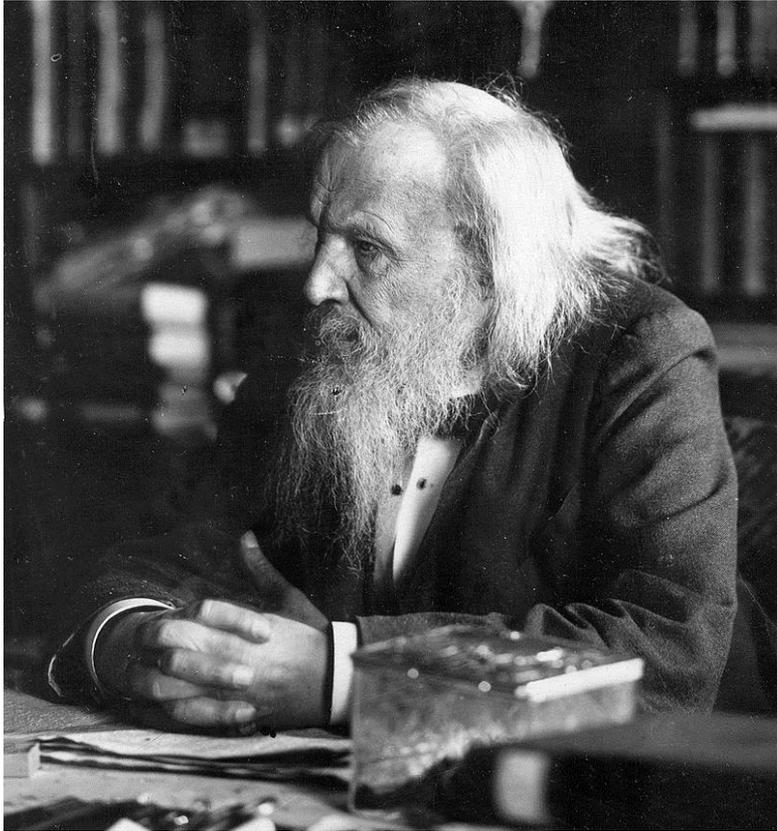
Tavola degli elementi di Meyer del 1869-70



50

I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX
	B	Al				In(?)		Tl
	C	Si	Ti		Zr	Sn		Pb
	N	P	V	As	Nb	Sb	Ta	Bi
	O	S	Cr	Se	Mo	Te	W	
	F	Cl	Mn Fe Co Ni	Br	Ru Rh Pd	I	Os Ir Pt	
Li	Na	K	Cu	Rb	Ag	Cs	Au	
Be	Mg	Ca	Zn	Sr	Cd	Ba	Hg	

Dmitrij Ivanovič Mendeleev (1834 – 1907)



Definì una tavola periodica di **63 elementi (1869)**

Mendeleev preparò 63 carte, una per ciascun elemento, sulle quali dettagliò le caratteristiche di ognuno.

Ordinando le carte, secondo il **peso atomico** crescente, si accorse che le proprietà chimiche degli elementi si ripetevano periodicamente.

Sistemò i 63 elementi conosciuti nella sua tavola e lasciò tre spazi vuoti per gli elementi ancora sconosciuti.

Dmitrij Ivanovič Mendeleev (1834 – 1907)

Quadro di un sistema di elementi basato sul loro peso atomico e la loro somiglianza chimica

		Ti = 50	Zr = 90	? = 180.
		V = 51	Nb = 94	Ta = 182.
		Cr = 52	Mo = 96	W = 186.
		Mn = 55	Rh = 104,4	Pt = 197,1.
		Fe = 56	Rn = 104,4	Ir = 198.
		Ni = Co = 59	Pt = 106,8	Os = 199.
H = 1		Cu = 63,4	Ag = 108	Hg = 200.
Be = 9,1	Mg = 24	Zn = 65,2	Cd = 112	
B = 11	Al = 27,1	? = 68	Ur = 116	Au = 197?
C = 12	Si = 28	? = 70	Sn = 118	
N = 14	P = 31	As = 75	Sb = 122	Bi = 210?
O = 16	S = 32	Se = 79,4	Te = 128?	
F = 19	Cl = 35,5	Br = 80	I = 127	
Li = 7	Na = 23	K = 39	Rb = 85,4	Cs = 133
		Ca = 40	Sr = 87,6	Ba = 137
		? = 45	Ce = 92	Pb = 207.
		?Er = 56	La = 94	
		?Yt = 60	Di = 95	
		?In = 75,6	Th = 118?	

Tavola periodica originale di Mendeleev.

Il **6 marzo 1869** Mendeleev presentò la relazione *L'interdipendenza fra le proprietà dei pesi atomici degli elementi* alla Società Chimica Russa. Senza che Mendeleev lo sapesse, pochi anni prima avevano già tentato l'impresa Lothar Meyer (1864) e John Newlands (1865), le cui tavole non consentivano però la previsione di nuovi elementi ancora non scoperti.

Dmitrij Ivanovič Mendeleev (1834 – 1907)

Le proprietà del **germanio** e quelle previste da Mendeleev

Proprietà	Previsione di Mendeleev (1871)	Verifica sperimentale (1886)
massa atomica relativa densità (g cm^{-3}) volume atomico ($\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$)	72 5,5 13	72,3 5,5 13
<i>Azione dell'elemento su</i> (a) acidi (b) alcali	limitata nessuna	non reagisce con HCl non reagisce con KOH a freddo; attaccato da KOH fuso
<i>Ossido dell'elemento</i> formula densità (g cm^{-3}) volume molare ($\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$)	XO_2 4,7 22	GeO_2 4,7 22
<i>Tetracloruro</i> formula punto di ebollizione densità (g cm^{-3}) volume molare ($\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$)	XCl_4 90 °C 1,9 113	GeCl_4 86 °C 1,9 113

Dmitrij Ivanovič Mendeleev (1834 – 1907)

Come, parrebbe, sia stato valutato l'articolo di Mendeleev ?

Referee

This paper is just a rehash of a lot of known facts and contains nothing new. In the unlikely event that it should be published, the table should be omitted since it takes up a lot of space.

M. D. Rubin, Chemistry in New Zealand, 128-132 (2011)

... dai corpi semplici alla topologia molecolare alla struttura 3D ...

Corpi semplici indistinti di cui gli elementi erano parte



La **molecola** come oggetto reale costituita da atomi



Gli elementi come **atomi** organizzati in relazione tra loro



Il concetto di **struttura molecolare**

La Scuola di Palermo



Körner, Cannizzaro, Paternò, Piria (?) (Palermo)

Wilhelm Körner (Kassel, 1839 – Milano, 1925)



Studi sull'isomeria delle così dette sostanze aromatiche a sei atomi di carbonio.

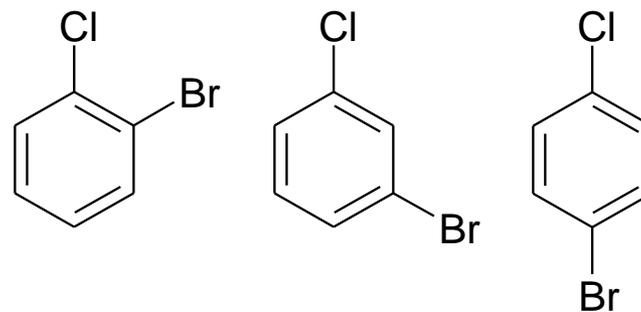
Gazzetta Chimica Italiana, vol. IV, p.305, **1874**



Wilhelm Körner (Kassel, 1839 – Milano, 1925)



Per distinguere le differenze nelle proprietà chimico-fisiche osservate nei benzene di-sostituiti, Körner propose di distinguerli in **ortho-, meta-, e para-**.



struttura molecolare

alcune note storiche



“... : benchè certamente si traveggano già dei **rapporti fra la costituzione chimica (composizione e struttura) e le proprietà fisiche** loro, è ancor certamente di gran lunga troppo ristretto il numero dei fatti, per dedurne delle conseguenze, che oltre al carattere d'una semplice ipotesi possono pretendere anche quello della probabilità.

In ogni caso tali rapporti non sono di natura tanto semplice come a priori forse era lecito aspettarsi.

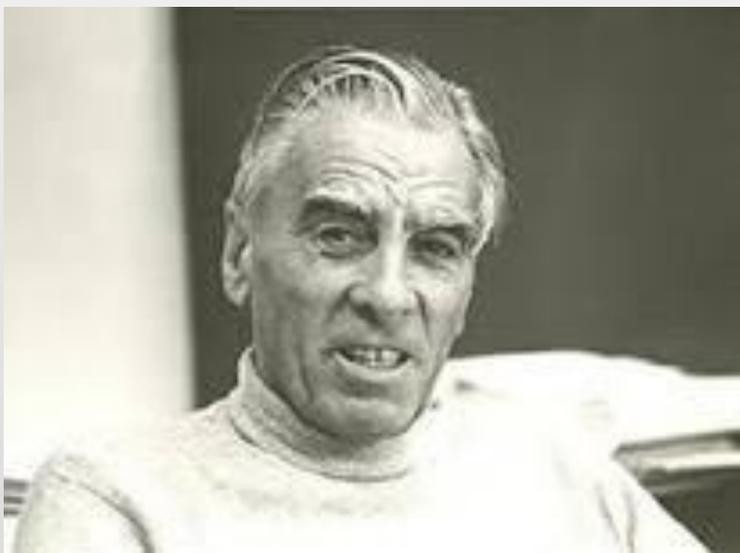
Di certo **le proprietà fisiche dei corpi sono** in primo luogo **una funzione della composizione e struttura** loro, sulla di cui forma nulla ancora si sa; funzione probabilmente molto complessa e per il di cui studio occorrerà un imprevedibile numero di fatti, onde poter sufficientemente restringere la cerchia delle rappresentazioni possibili.”

Corvin Hansch (Kanmare (Utah), 1918 – Claremont (CA), 2011)

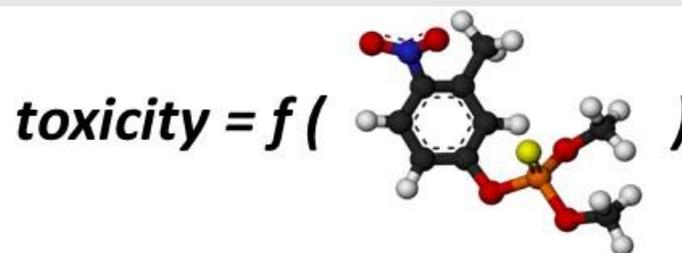


E' l'iniziatore degli studi delle relazioni tra la struttura molecolare e le attività biologiche

Quantitative Structure-Activity Relationships

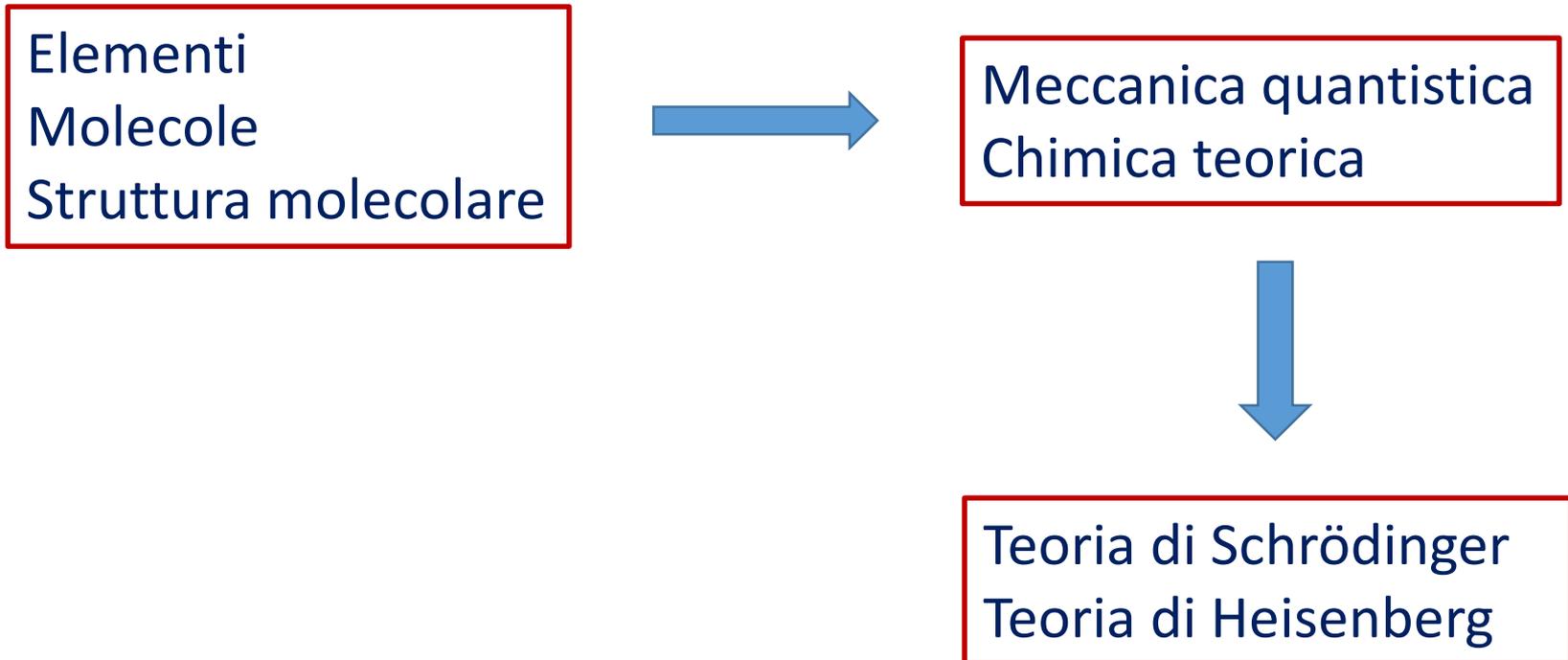


QSAR
1960

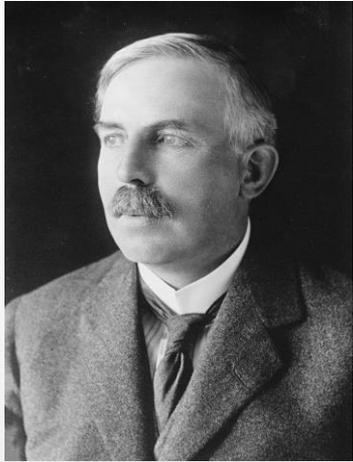




Prima metà del '900



La giustificazione teorica della tavola di Mendeleev



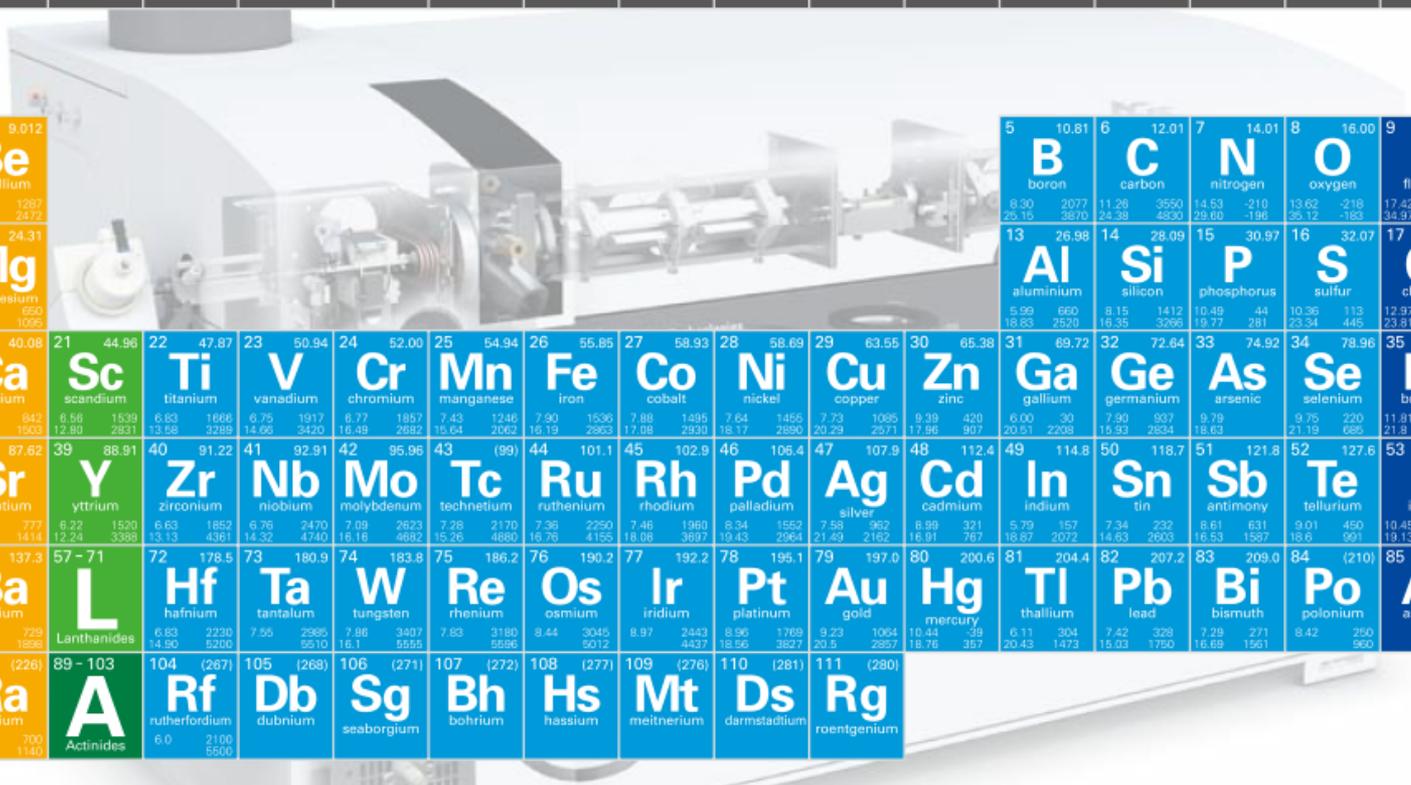
Ernest Rutherford, 1911: teoria degli orbitali atomici

Noels Bohr, 1913: modello dell'atomo



Giustificazione teorica della tavola di Mendeleev

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	1 H hydrogen 1.008																	2 He helium 4.003	1
2	3 Li lithium 6.941	4 Be beryllium 9.012											5 B boron 10.81	6 C carbon 12.01	7 N nitrogen 14.01	8 O oxygen 16.00	9 F fluorine 19.00	10 Ne neon 20.18	2
3	11 Na sodium 22.99	12 Mg magnesium 24.31											13 Al aluminium 26.98	14 Si silicon 28.09	15 P phosphorus 30.97	16 S sulfur 32.07	17 Cl chlorine 35.45	18 Ar argon 39.95	3
4	19 K potassium 39.10	20 Ca calcium 40.08	21 Sc scandium 44.96	22 Ti titanium 47.87	23 V vanadium 50.94	24 Cr chromium 52.00	25 Mn manganese 54.94	26 Fe iron 55.85	27 Co cobalt 58.93	28 Ni nickel 58.69	29 Cu copper 63.55	30 Zn zinc 65.38	31 Ga gallium 69.72	32 Ge germanium 72.64	33 As arsenic 74.92	34 Se selenium 78.96	35 Br bromine 79.90	36 Kr krypton 83.80	4
5	37 Rb rubidium 85.47	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.91	40 Zr zirconium 91.22	41 Nb niobium 92.91	42 Mo molybdenum 95.96	43 Tc technetium (99)	44 Ru ruthenium 101.1	45 Rh rhodium 102.9	46 Pd palladium 106.4	47 Ag silver 107.9	48 Cd cadmium 112.4	49 In indium 114.8	50 Sn tin 118.7	51 Sb antimony 121.8	52 Te tellurium 127.6	53 I iodine 126.9	54 Xe xenon 131.3	5
6	55 Cs caesium 132.9	56 Ba barium 137.3	57-71 L Lanthanides	72 Hf hafnium 178.5	73 Ta tantalum 180.9	74 W tungsten 183.8	75 Re rhenium 186.2	76 Os osmium 190.2	77 Ir iridium 192.2	78 Pt platinum 195.1	79 Au gold 197.0	80 Hg mercury 200.6	81 Tl thallium 204.4	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 209.0	84 Po polonium (210)	85 At astatine (210)	86 Rn radon (222)	6
7	87 Fr francium 223.1	88 Ra radium (226)	89-103 A Actinides	104 Rf rutherfordium (267)	105 Db dubnium (268)	106 Sg seaborgium (271)	107 Bh bohrium (272)	108 Hs hassium (277)	109 Mt meitnerium (276)	110 Ds darmstadtium (281)	111 Rg roentgenium (280)								7

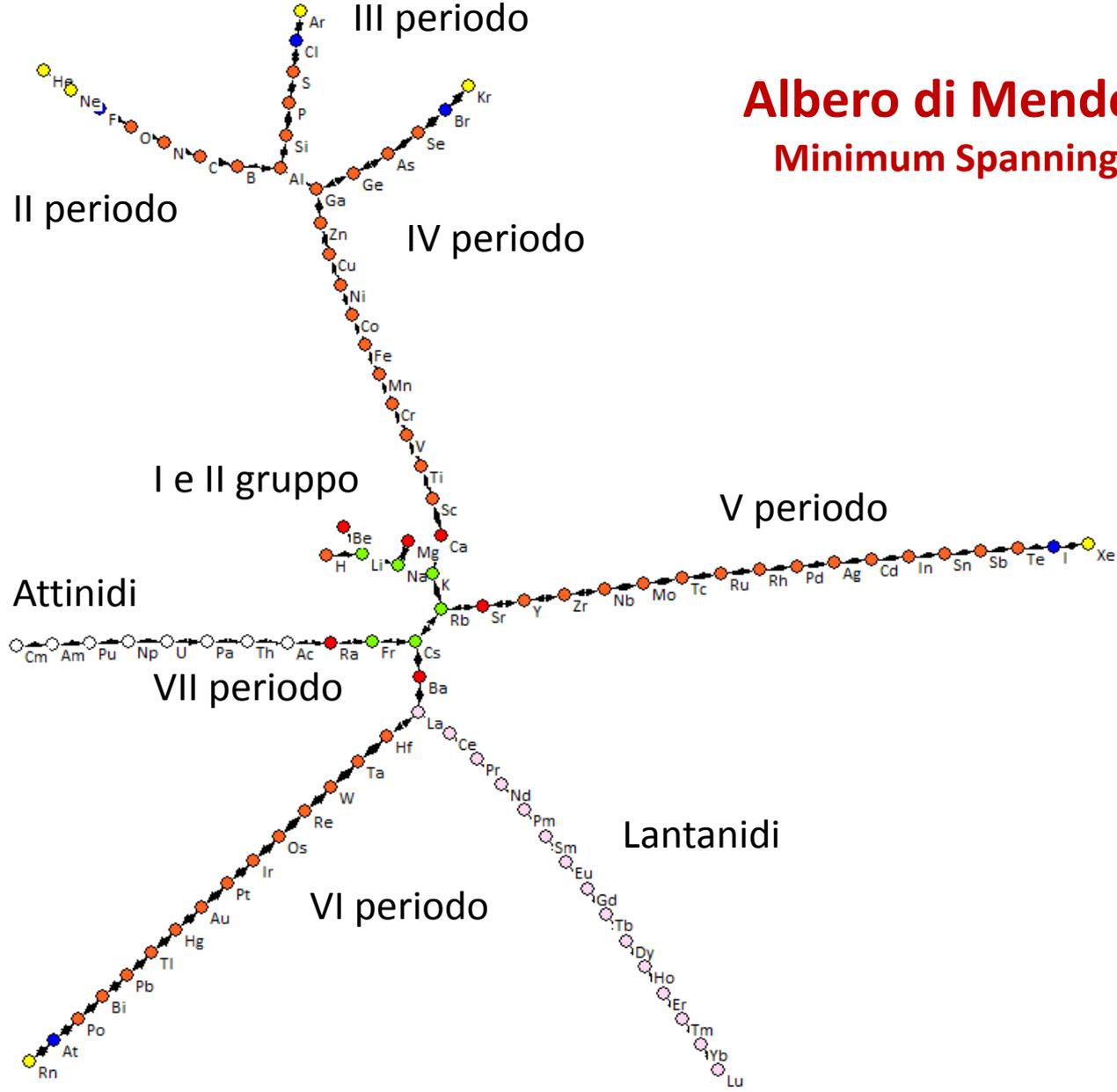


L Lanthanides	57 La lanthanum 138.9	58 Ce cerium 140.1	59 Pr praseodymium 140.9	60 Nd neodymium 144.2	61 Pm promethium (145)	62 Sm samarium 150.4	63 Eu europium 152.0	64 Gd gadolinium 157.3	65 Tb terbium 158.9	66 Dy dysprosium 162.5	67 Ho holmium 164.9	68 Er erbium 167.3	69 Tm thulium 168.9	70 Yb ytterbium 173.1	71 Lu lutetium 175.0
A Actinides	89 Ac actinium (227)	90 Th thorium 232.0	91 Pa protactinium 231.0	92 U uranium 238.0	93 Np neptunium (237)	94 Pu plutonium (239)	95 Am americium (243)	96 Cm curium (247)	97 Bk berkelium (247)	98 Cf californium (251)	99 Es einsteinium (252)	100 Fm fermium (257)	101 Md mendelevium (258)	102 No nobelium (259)	103 Lr lawrencium (262)

atomic number	atomic weight
Element Symbol	
(eV) first ionization potential	(°C)/1 atm melting point
second ionization potential	boiling point

Albero di Mendeleev

Minimum Spanning Tree



Conclusioni



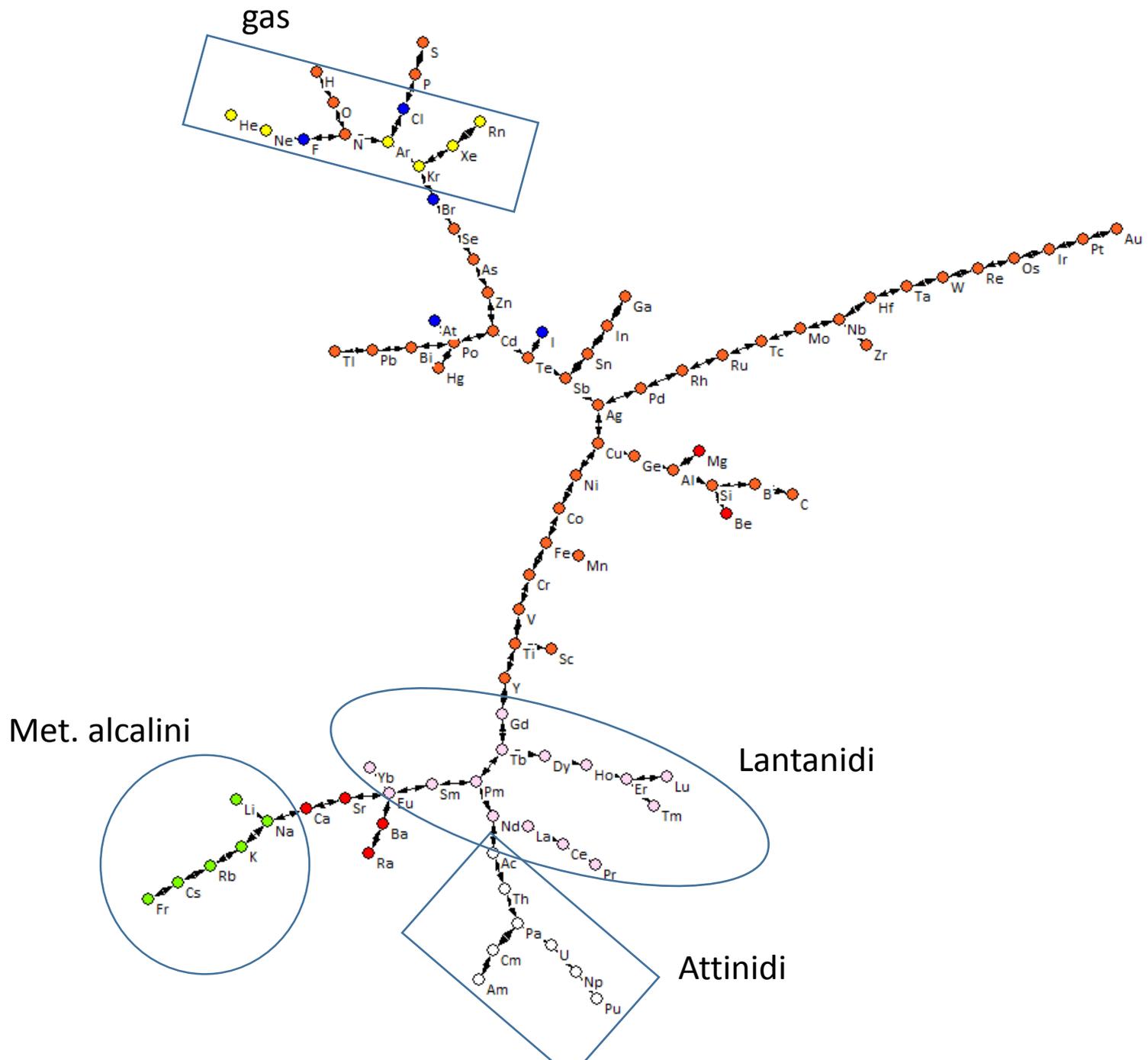
Grazie per la vostra attenzione



Aleksandr Michajlovič Butlerov (Cistopol, 1828 – 1886)



Tra il 1857 e il 1861 cominciò a sviluppare il concetto di struttura chimica, incorporando i doppi legami nella struttura molecolare.



Wilhelm Korner (Kassel, 1839 – Milano, 1925)



Lorenzo Romano Amedeo Carlo Avogadro (Torino, 1776 – 1856)

SPFS, vol. 5, p. 76: valenza

SPFS, vol. 5, p. 77-78: Mendeleev

Bachelard, Epistemologia, p. 77 (da Il Materialismo razionale), Mendeleev

Bachelard, Il materialismo razionale, p.113-119: Mendeleev



Teoria del flogisto: (Ernst Stahl, 1660-1734))

Fine della teoria del flogisto: Antoine Laurent de Lavoisier (1770, 1783)

Numero di Avogadro: Avogadro (1811)

Concetto di molecola: ()

Nozione di valenza: Edward Frankland (1812)

Teoria molecolare: Stanislao Cannizzaro (1858)

Teoria della valenza: August Kekulè (1857-58) e Adolphe Wurtz (1870?)

Ordinamento degli elementi: Dimitrij Mendeleev (1869) e Lothard Meyer (1870)

La molecola come struttura: Wilhelm Körner (1874) e Alexander Butlerov (1874)

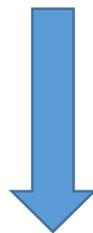
Teoria atomica: Ernest Rutherford (1911)

... dalla topologia molecolare alla struttura 3D ...

La molecola come razionalizzazione simbolica



La molecola come oggetto reale



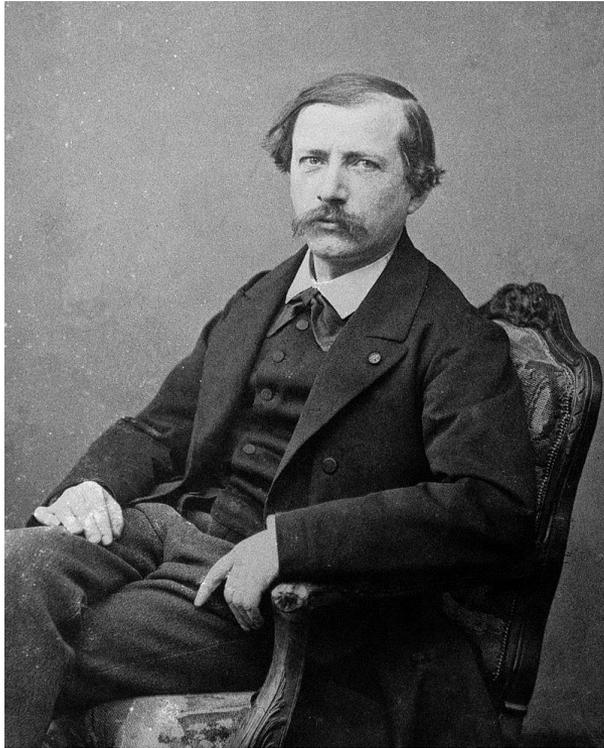
Il concetto di struttura molecolare

Edward Frankland (Churchtown, 1825 – Gaja, 1899)

La prima nozione di valenza (1812)



Marcelin Pierre Eugène Berthelot (Parigi, 1827 – 1907)



«La chimie creò son objet»

Julius Lothar Meyer (Varel, 1830 – Tubinga, 1895)



Nel **1864** Meyer pubblicò una prima versione della tavola periodica, contenente **28 elementi** classificati per la prima volta in 6 famiglie secondo la valenza.